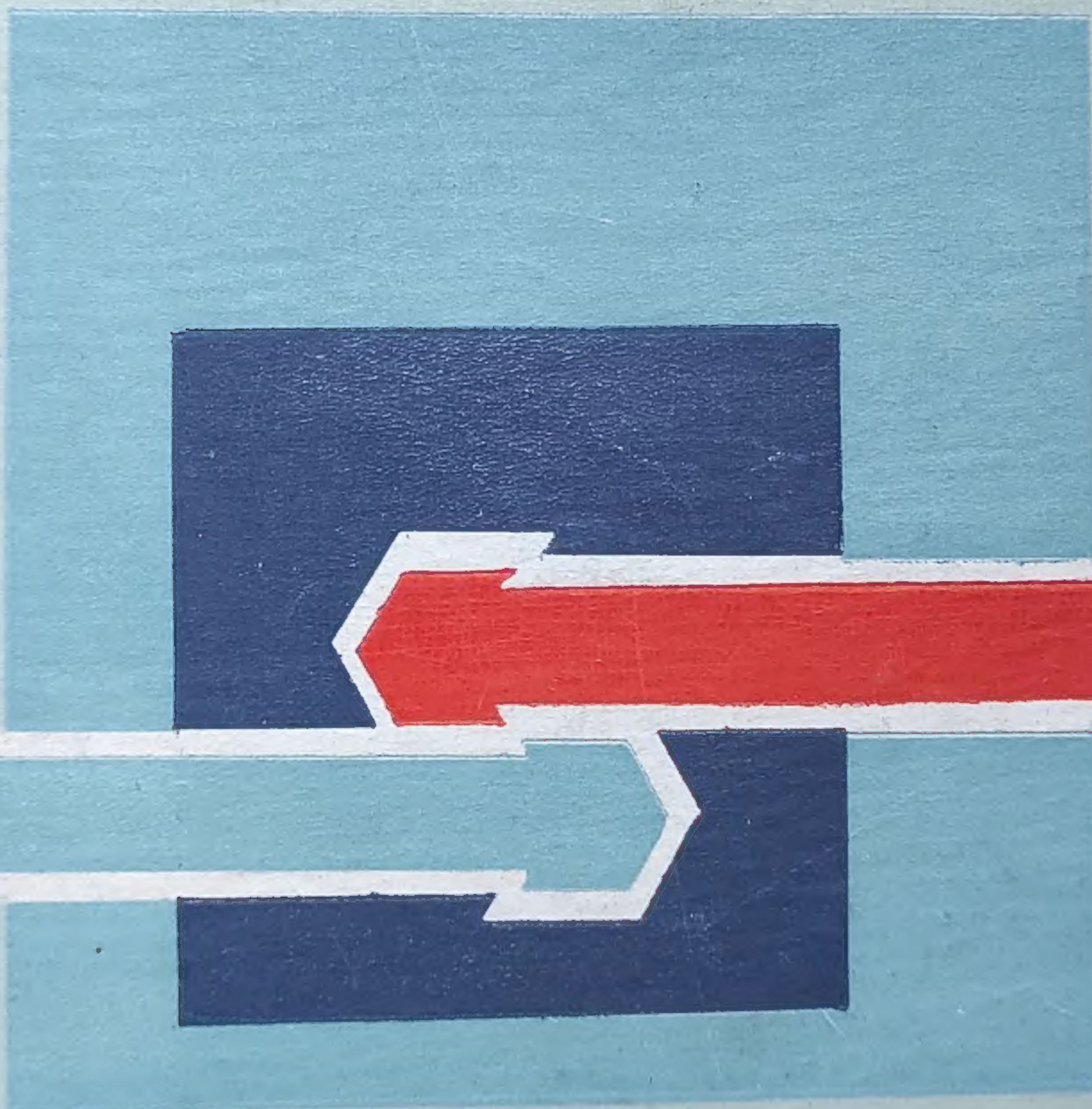


I. Ința



Complemente de fizică



Editura tehnică

Ioan INȚA

Complemente de fizică II

Editura Tehnică
București — 1985



CUVÎNT ÎNAINTE

În volumul al doilea al cărții „Complemente de fizică” sînt cuprinse cîteva capitole de bază ale fizicii microcosmosului și anume: elemente de mecanică cuantică și de fizică statistică cuantică, teoria cuantică a atomului și moleculei, elemente de fizica corpului solid (cristalin), fizica nucleului și fizica particulelor elementare.

Am căutat să realizez și în acest volum o expunere pe cît posibil deductivă a unui sistem vast de cunoștințe, fără a trata, însă, probleme prea complicate, care să necesite calcule greu de urmărit. Insistînd îndeosebi asupra principiilor de bază ale fiecărui capitol, am încercat să prezint, în tratarea lor obișnuită, elementele de fizică cu semnificație majoră, absolut necesare pentru formarea unei imagini unitare atît asupra fenomenelor studiate, cît și a metodelor de calcul, respectiv a concluziilor de ordin practic ce se desprind din studiul cuantic al unor fenomene fizice de la scara microcosmică de organizare a materiei.

Notarea capitolelor, a paragrafelor și a formulelor succede celor folosite în primul volum și, de aceea, o serie de rezultate preluate din acest volum sînt menționate direct, prin simpla indicare a numărului relației respective.

Pentru a înlesni înțelegerea limbajului matematic folosit, am expus, în cadrul unor anexe, cîteva elemente de calcul diferențial vectorial, de calcul matriceal și de funcții speciale.

Ca și primul volum, cartea se adresează unui public larg: ingineri de toate specializările, fizicieni, chimiști, biologi, profesori de liceu, precum și studenți și cadre didactice, îndeosebi de la institutele de învățămînt superior tehnic, dar și de la facultățile în care fizica se predă ca disciplină generală

Aduc și pe această cale mulțumiri deosebite academicianului Ioan Ursu pentru sprijinul și îndrumările date în formarea mea științifică, pentru interesul, încurajările și ajutorul acordat în realizarea acestei cărți. Sînt recunoscător, de asemenea, dr. Dan Vamanu precum și dr. Emil Burzo pentru sfaturile, sugestiile și observațiile făcute, care au contribuit la o substanțială îmbunătățire a conținutului prezentei cărți.

Brașov, 2 aprilie 1984

AUTORUL

CUPRINS

Capitolul VIII. ELEMENTE DE MECANICĂ CUANTICĂ	7
8.1. Introducere	7
8.2. Dualitatea undă-corpusul la lumină (noțiuni de optică fonică)	10
8.3. Dualitatea undă-corpusul la electron (noțiuni de optică electronică).	19
8.4. Funcția de undă și interpretarea ei statistică	28
8.5. Limbajul și postulatele mecanicii cuantice	33
8.6. Ecuația lui Schrödinger	41
8.7. Relații de corelație în mecanica cuantică	45
8.8. Teoria cuantică a mișcării microparticulelor în cimpuri de forțe conserva- tive	47
8.9. Cuantificarea unui cimp electromagnetic	74
8.10. Metode aproximative de rezolvare a ecuației lui Schrödinger	77
8.11. Ecuațiile lui Dirac. Noțiuni de mecanică cuantică relativistă	85
Capitolul IX. ELEMENTE DE MECANICĂ STATISTICĂ CUANTICĂ	93
9.1. Consecințe ale cuantificării spațiului fazelor	93
9.2. Descrierea gazului ideal în statistica cuantică	97
9.3. Statistica cuantică a mișcărilor de vibrație. Teoria lui Einstein a căldurilor specifice la solide	99
9.4. Principiul identității microparticulelor și principiul de excludere.	100
9.5. Modelul de gaz ideal constituit din bosoni, respectiv din fermioni.	106
9.6. Radiația termică	111
Capitolul X. ELEMENTE DE FIZICĂ ATOMICĂ ȘI MOLECULARĂ	114
10.1. Introducere	114
10.2. Atomul hidrogenoid	115
10.3. Atomi cu mai mulți electroni. Modelul vectorial al atomului.	127
10.4. Stări atomice excitate. Emisia spontană și stimulată de radiație. Spectre atomice	132
10.5. Ciocniri atomice. Noțiuni de teoria cuantică a împrăstierii microparticulelor	142
10.6. Atomul în cimpuri magnetice și electrice staționare	146
10.7. Teoria cuantică a moleculei. Forțele de schimb	151
10.8. Spectre moleculare	161

Capitolul XI. ELEMENTE DE FIZICA STĂRII SOLIDE	164
11.1. Noțiuni introductive	164
11.2. Starea cristalină și simetria ei. Rețele și structuri cristaline	166
11.3. Starea electronilor în structuri cristaline	205
11.4. Proprietăți elastice și termice la solid	221
11.5. Proprietăți electrice ale solidului	231
11.6. Proprietăți magnetice ale solidului	248
11.7. Proprietăți optice la solid	263
11.8. Efecte încrucișate în solid	265
11.9. Noțiuni de fizica suprafeței	269
11.10. Elemente de fizica peliculelor subțiri	275

Capitolul XII. ELEMENTE DE FIZICA NUCLEULUI ȘI A PARTICULELOR ELEMENTARE	279
12.1. Introducere	279
12.2. Caracteristicile nucleului atomic	282
12.3. Forțe nucleare	308
12.4. Modele nucleare	315
12.5. Radioactivitatea	323
12.6. Reacții nucleare	337
12.7. Alte surse de radiații nucleare. Acceleratoare de particule și radiația cosmică	353
12.8. Interacția radiației cu substanța	360
12.9. Energia nucleară	367
12.10. Particule elementare	376

Anexe	405
-----------------	-----

Bibliografie	431
------------------------	-----

Elemente de mecanică cuantică

§ 8.1. INTRODUCERE

Teoria câmpului electromagnetic (teoria lui Maxwell, expusă în cap. VI din [44]) și, apoi, extinderea acestei teorii asupra fenomenelor luminoase (vezi cap. VII) au întregit, la sfârșitul veacului trecut, amplul tablou al fizicii clasice, în cadrul căruia a putut fi cuprinsă, sistematizată și articulată într-o tratare unitară imensa cantitate de date experimentale și de constatări fenomenologice acumulate pînă la acea epocă.

Concomitent, au început să creeze preocupări și o serie de cazuri în care teoriile clasice conduceau la concluzii în vădită contradicție cu datele realității. Un astfel de caz este cel al *radiațiilor termice* (§7.2 și §9.6). Studiul acestor radiații, făcut în cadrul unei tratări sistematice clasice, i-a condus pe Rayleigh și Jeans la rezultatul — evident inacceptabil — că energia unei radiații electromagnetice, aflată în echilibru termodinamic cu sursele care o emit sau o absorb, are valoare infinită. Într-adevăr, dacă se admite că în expresia puterii de emisie spectrală $r_T^N(\lambda)$ a unui corp absolut negru, dată de (7.2.29), intră numai două dintre constantele universale ale fizicii clasice și anume, viteza luminii în vid c și constanta lui Boltzmann k_b , atunci în locul funcției (7.2.29) trebuie să luăm :

$$r_T^N(\lambda) = r^N(T, \lambda, c, k_b). \quad (8.1.1)$$

Prin calcul dimensional, punînd funcția $r^N(T, \lambda, c, k_b)$ sub forma

$$r_T^N(\lambda) = \Lambda \lambda^a T^b c^d k_b^e \quad (8.1.2)$$

se va obține identitatea

$$ML^{-1} T^{-3} \equiv M^e L^{a+d+2e} T^{-d-2e} \Theta^{b-e}.$$

Egalarea exponentilor mărimilor fundamentale M , L , T și Θ din cele două părți ale identității de mai sus conduce la sistemul

$$e = 1; \quad a + d + 2e = -1; \quad -d - 2e = -3; \quad b - e = 0.$$

din a cărui rezolvare rezultă valorile: $a = -4$; $b = 1$; $d = 1$; $e = 1$. Deci

$$r_T^N(\lambda) = \Lambda \frac{ck_b T}{\lambda^4} \quad (8.1.3)$$

Pe cale teoretică (§9.6) se obține valoarea 4π pentru coeficientul adimensional Λ , așa încît formula Rayleigh-Jeans va fi dată de expresia

$$r_T^N(\lambda) = \frac{4\pi c}{\lambda^4} k_b T. \quad (8.1.4)$$

Experiența arată că dependența de lungimea de undă a puterii spectrale de emisie a unui corp este de forma (8.1.4), dar numai pentru radiații termice cu lungimi de undă mari. De altfel, se observă că pentru $\lambda \rightarrow 0$, legea Rayleigh-Jeans conduce la o putere de emisie integrală infinit de mare („catastrofă ultravioletă”), în contradicție cu legea Stefan-Boltzmann

$$R_T^N = \sigma T^4 \quad (8.1.5)$$

care este bine verificată de datele experimentale.

Rezultatul obținut de Rayleigh și Jeans a contrariat mediile științifice ale timpului, întrucît scotea în evidență incapacitatea fizicii clasice de a explica modul în care emit radiații corpurilor încălzite. Mai târziu, cînd procesele de emisie și de absorbție a luminii au fost legate de învelișul electronic al atomilor (în modelul planetar al lui Rutherford, 1909), teoriile clasice au fost confruntate cu o nouă dificultate insolubilă — aceea de a explica menținerea stabilității atomului, în condițiile emisie de radiație (vezi §6.10.2). Între timp, s-a constatat că fizica clasică vine în contradicție și cu legile experimentale ale *efectului fotoelectric*, efect pe care îl produce lumina la interacția cu electronii liberi din metale.

Studiul efectului fotoelectric, ca și al altor fenomene care au loc la scara microcosmică, a scos în evidență că modul de comportare a microparticulelor la acest nivel este total diferit de cel al corpurilor macroscopice. La început, interpretarea acestui comportament a cunoscut o dificultate conceptuală majoră, decurgînd din faptul că, în anumite fenomene, microparticulele își relevă caracteristici corpusculare (poziție, impuls, moment cinetic etc.), iar în altele, caracteristici ondulatorii (lungime de undă, frecvență etc.). Pentru caracterizarea acestui mod specific de comportare s-a introdus expresia „dualitate undă-corpusul”, iar acceptarea de drept a acestui fapt ireductibil s-a făcut prin recurgerea la un nou principiu — „al complementarității”.

Experiența arată că această dualitate este specifică lumii microcosmice și întrucît mecanica, termodinamica, electrodinamica, optica — în general, întreaga fizică clasică — nu iau în considerație o astfel de specificitate, reflectarea pe care o dau microcosmosului nu poate fi adecvată, iar multe din rezultatele la care se ajunge în studiul acestei lumi nu pot fi decît eronate. Se știe că prima bresă în modul clasic de a concepe un fenomen fizic o constituie noțiunea de *cuantă de energie*, introdusă în anul 1900, de către Max Planck, în studiul radiației termice. Această

noțiune l-a condus mai târziu (1913) pe Niels Bohr la formularea ipotezei *stărilor staționare* pentru electronul din atomul de hidrogen, stări în care mărimile dinamice descriind starea de mișcare a electronului, cum sînt impulsul, momentul cinetic, energia etc., pot lua numai anumite valori discrete, discernabile între ele prin șirul unor numere întregi, denumite *numere cuantice*. Experiențele lui Frank și Hertz (1913), respectiv ale lui Stern și Gerlach (1927) (vezi §10.2 și 8.11), au demonstrat convingător existența acestor stări staționare, permițînd să se obțină în același timp o determinare directă a valorilor cuantificate ale energiei E_n și respectiv ale componentei L_z a momentului cinetic ale unor electroni legați din atom.

Existența, pentru microparticule, a unor astfel de stări cuantificate trebuie desigur să se manifeste și în fenomenele la care participă un număr mare de microparticule, fenomene descrise de fizica statistică, respectiv de termodinamică. Dar fizica statistică clasică și-a obținut succese incontestabile fără să facă apel, firește, la ideea cuantelor; dezvoltări ulterioare, ce au încorporat această idee, au generat statistica cuantică.

Apariția noilor teorii, ce reflectă dualitatea undă-corpusul și consecințele ei — *mecanica cuantică* și *fizica statistică cuantică* — a fost, prin urmare, determinată tocmai de noile date experimentale. Aceste teorii și-au formulat principiile de bază în strînsă legătură cu studiul dualității undă-corpusul în cazul luminii, respectiv al electronului, așa încît se poate spune că teoriile cuantice, deși recurgînd la un aparat conceptual abstract și la un formalism matematic de nivel înalt, au izvorît direct din practică. În deceniul al treilea al secolului nostru s-au constituit atît *mecanica cuantică nerelativistă* (L. de Broglie, E. Schrödinger, W. Heisenberg, M. Born, N. Bohr și alții), cît și *mecanica cuantică relativistă* (Pauli, Dirac), în paralel elaborîndu-se metodele *statisticii cuantice* (începînd cu statistica Bose-Einstein și statistica Fermi-Dirac; vezi §9.4). Cu ajutorul acestor noi teorii s-a putut descrie corect o multitudine de fenomene fizice de la nivel atomic și molecular (cap. X), precum și cele privitoare la starea solidă cristalină (cap. XI).

Întrucît dualitatea undă-corpusul este prezentă și la nivel nuclear și intranuclear ar fi de așteptat ca limbajul mecanicii cuantice și al statisticilor cuantice să fie aplicabil și la aceste nivele ale structurii materiei. Strădaniile depuse pentru a se face o astfel de extindere (cap. XII) nu sînt însă răsplătite deocamdată cu rezultate la fel de spectaculoase ca cele din cazul fizicii atomice, din cauză că la aceste nivele intervin interacții specifice, cum sînt *interacțiile tari* și *interacțiile slabe*, ale căror caracteristici nu se bucură încă de o descriere la fel de consistentă ca cea conferită interacțiilor electromagnetice, care intervin la nivel atomic și molecular. În plus, caracteristicile cunoscute ale acestor interacții ne arată că este vorba de fenomene ce complică extrem de mult formalismul matematic al teoriilor cuantice.

Nu putem să nu semnalăm însă succesele incontestabile obținute în ultimii ani pe tărîmul *cromodinamicii cuantice* (o teorie în curs de constituire a interacțiilor tari) și al *teoriei electro-slabe* (rezultat al celei mai izbutite, pînă în prezent, tentative de unificare a două din cele patru tipuri fundamentale de interacții — cele electromagnetice și slabe).

Cuceriri cardinale ale fizicii secolului nostru, relativitatea și mecanica cuantică definesc în prezent cadrul în expansiune al acestei științe ale cărei extreme — teoria particulelor elementare și a câmpurilor cuantice, pe de o parte, cosmologia și astrofizica, pe de altă parte — se ating, cu rezultate mereu mai substanțiale, promițătoare.

§ 8.2. DUALITATEA UNDĂ-CORPUSCUL LA LUMINĂ (NOȚIUNI DE OPTICĂ FOTONICĂ)

Impactul pe care l-a avut teoria cuantelor de energie asupra studiului altor fenomene optice a fost deosebit de puternic, determinând soluționări pe baza unor concepte cu totul noi a problemelor pe care teoriile clasice le lăsaseră nerezolvate. În continuare vom prezenta câteva astfel de probleme, precum și noile abordări ce le-au fost consacrate.

8.2.1 EFECTUL FOTOELECTRIC

Acest efect a fost descoperit în anul 1888 de către H. Hertz, pornind de la constatarea că descărcarea prin scînteie electrică, între doi electrozi, a unui condensator se declanșează la tensiuni mai mici atunci cînd electrozii sînt iradiați cu lumină ultravioletă. Ulterior, prin introducerea celor doi electrozi într-o incintă vidată s-a obținut celula fotoelectrică (fig. 8.2.1)

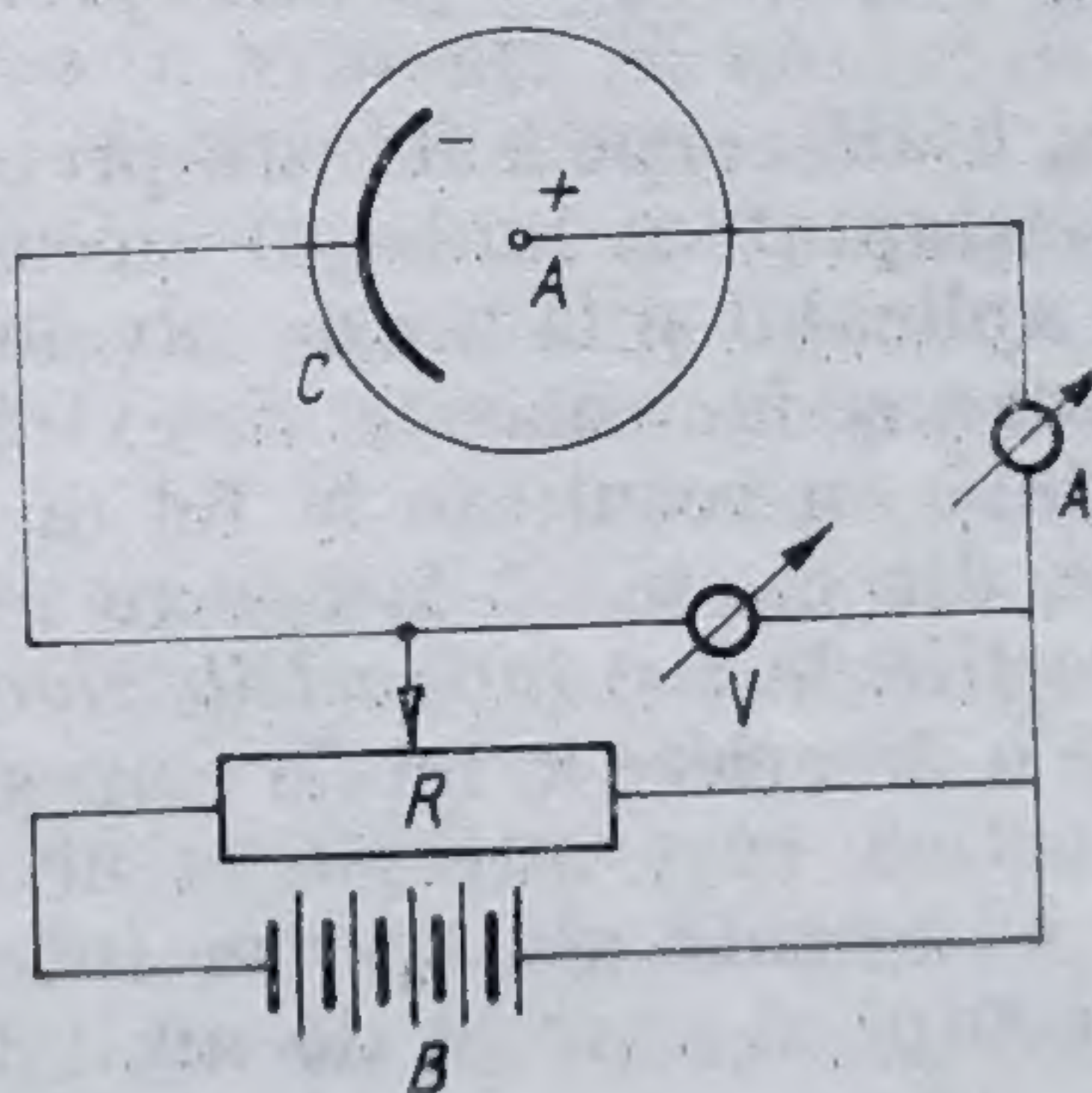


Fig. 8.2.1.

iar prin studii experimentale asupra acestor celule s-a putut stabili că efectul fotoelectric (denumit și efect fotoelectric extern) constă din emisia de electroni (fotoelectroni) de către catodul celulei sub acțiunea radiațiilor luminoase.

Au fost puse în evidență următoarele trei legi experimentale ale efectului :

1) Intensitatea I a curentului de fotoelectroni ce se stabilește în circuitul fotocelulei variază direct proporțional cu iluminarea H a catodului acesteia.

2) În circuitul fotocelulei se generează un curent de fotoelectroni și în lipsa sursei B de alimentare electrică a celulei, atunci când catodul fotocelulei se iradiază cu radiații a căror frecvență ν depășește o anumită valoare minimă ν_0 , numită *frecvență de prag* a efectului.

3) Viteza fotoelectronilor smulși din catod crește odată cu frecvența ν a radiației cu care se iradiază catodul.

Este important să subliniem că ultimele două legi nu pot fi explicate pe baza teoriei electromagnetice clasice a luminii. Într-adevăr, dacă se admite că fotoelectronii provin dintre electronii de conducție prezenți în rețeaua metalică a catodului, cărora li se transmite pe cale electrică o anumită energie, atunci, în câmpul electric $\mathbf{E} = E_0 \sin(\omega t - kx)$ al unei unde luminoase plane, electronul va executa o mișcare oscilatorie armonică, descrisă de ecuația

$$m_e \ddot{x} = eE_0 \sin(\omega t - kx) \quad (8.2.1)$$

cu viteza

$$v = \int \ddot{x} dt = \frac{eE_0}{m_e \omega} \cos(\omega t - kx). \quad (8.2.2)$$

Rezultă că energia cinetică T a electronului din metal

$$T = \frac{m_e v^2}{2} = \frac{1}{2m_e} \left(\frac{eE_0}{\omega} \right)^2 \cos^2(\omega t - kx). \quad (8.2.3)$$

va crește o dată cu micșorarea frecvenței ν a radiației luminoase absorbite. Dar energia cinetică a fotoelectronilor smulși din metal este proporțională cu T și se ajunge astfel la concluzia că viteza acestor fotoelectroni ar trebui să crească o dată cu scăderea frecvenței radiațiilor luminoase, o comportare exact opusă celei evidențiate de experiență.

Dacă, pe de altă parte, s-ar presupune că fotoelectronii provin dintre electronii legați de nodurile rețelei cristaline metalice, atunci, întrucât acești electroni pot participa numai la mișcările de vibrație ale rețelei cristaline, absorbția radiației luminoase ar trebui să prezinte maxime de rezonanță, corespunzătoare frecvențelor de vibrație proprii ale rețelei. Or, nici astfel de maxime de rezonanță nu au fost puse în evidență în fenomenele de absorbție a luminii în metale. Se știe, dealtfel, că metalele posedă o mare capacitate de reflexie și o transparentă slabă pentru radiațiile din domeniul vizibil, ceea ce demonstrează că în fenomenele de interacție a luminii cu metalele intervin numai electronii liberi (electronii de conducție) din rețeaua metalică.

O asemenea analiză scoate în evidență faptul că fizica clasică nu poate explica efectul fotoelectric. Pornind de la o astfel de constatare A. Einstein reușește, în anul 1905, să formuleze o *teorie cuantică* pentru efectul fotoelectric, în strictă concordanță cu legile lui experimentale. La baza acestei noi teorii stă conceptul de *foton*, pe care Einstein îl formulează pe baza noțiunii de cuantă de radiație și a teoriei relativității restrânse. El admite că cuantele de radiație (introduse de Planck pentru explicarea proceselor de emisie și de absorbție al radiațiilor termice) se mențin ca entități și pe timpul propagării, comportându-se ca veritabili corpusculi*. Caracteristicile mecanice corpusculare ale fotonilor, respectiv masa și impulsul, se stabilesc pe baza legii relativiste de echivalență energie-masă, $E = mc^2$ și a unei ipoteze suplimentare potrivit căreia fotonii nu se pot afla decît în stare de mișcare, cu viteza $c = 3 \cdot 10^8$ m/s. Se obțin astfel expresiile :

$$m = h\omega/c^2 \quad (8.2.4)$$

și

$$p = mc = \frac{h}{\lambda} \quad (8.2.5)$$

$$p = h k \quad (8.2.6)$$

în care s-au folosit notațiile :

$$h = \frac{h}{2\pi} = 1,054 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}; \quad |k| = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (8.2.7)$$

h fiind constanta lui Planck, iar λ lungimea de undă a radiației respective.

Calculul numeric dau, pentru fotonii de radiație luminoasă cu $\lambda = (400 - 7500) \text{ \AA}$, mase de ordinul $(5,5 - 3) \cdot 10^{-36} \text{ kg}$, deci cu aproape cinci ordine de mărime mai mici decît masa proprie a electronului ($m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$), iar pentru fotonii de radiație Roentgen ($\lambda \in (10^2 - 10^{-2}) \text{ \AA}$), mase de ordinul de mărime a lui m_e . Aceste rezultate evidențiază faptul că efectele corpusculare ale luminii se vor releva ușor la interacția ei cu electronii, deoarece aceste interacții pot fi privite, într-o primă aproximație, ca simple ciocniri între fotoni și electroni.

Privind astfel lucrurile, Einstein admite că în cazul efectului fotoelectric intervin ciocniri plastice (perfect neelastice) între fotonii de radiație luminoasă și electronii liberi din metale. În aceste ciocniri fotonul transferă întreaga sa energie $h\nu$ electronului de conducție, care va consuma o parte, Φ_e pentru învingerea barierei de potențial existente la suprafața metalului, păstrînd restul sub formă de energie cinetică.

Pe baza legii de conservare a energiei se va obține egalitatea

$$h\omega = \Phi_e + \frac{m_e v^2}{2} \quad (8.2.8)$$

Această relație reprezintă *legea cuantică* a efectului fotoelectric.

* Corpusculul a fost conceput inițial ca un obiect mecanic de dimensiuni foarte mici, a cărui mișcare este descrisă de legile mecanicii clasice.

Simplitatea unei astfel de legi, ca și a mecanismului de interacție foton-electron pe care se bazează, este cu atât mai uimitoare cu cât ea descrie corect și în totalitate caracteristicile experimentale ale efectului fotoelectric. Așa, de exemplu, din relația (8.2.8) rezultă că efectul se va produce numai dacă frecvența radiației luminoase depășește frecvența de prag

$$\nu_0 = \frac{\Phi_e}{h} \quad (8.2.9)$$

determinată de lucrul de extracție Φ_e . De asemenea, viteza fotoelectronilor crește într-adevăr odată cu frecvența radiațiilor, în conformitate cu relația

$$v = \left[\frac{2}{m_e} (h\nu - \Phi_e) \right]^{1/2}. \quad (8.2.10)$$

Dar nu la fel de simplă va fi și imaginea pe care ne-o putem forma despre foton, în calitate sa de corpuscul de lumină. În primul rînd, dacă se admite că fotonul se poate deplasa numai cu viteza c , atunci pentru a salva relația relativistă

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (8.2.11)$$

sîntem nevoiți să admitem că pentru foton $m_0 = 0$, ceea ce este echivalent cu a spune că fotonul nu se poate găsi în repaus în raport cu nici unul dintre sistemele de referință inerțiale (respectiv că lui nu i se poate asocia un sistem de referință propriu). De aceea, corpusculul de lumină se va deosebi de o microparticulă (electron, proton etc.) prin aceea că el *nu are masă proprie*.

Faptul că viteza fotonului este întotdeauna egală cu c pare surprinzător, dacă avem în vedere că optica ondulatorie pune în evidență și viteza $v = \frac{c}{n} < c$, pentru lumina care se propagă în medii cu indici de refracție

supraunitari ($n > 1$). Dar o astfel de contradicție este numai aparentă și ea poate fi înlăturată ușor dacă se ține seama că propagarea luminii printr-un mediu trebuie privită, în cadrul concepției fotonice, ca o succesiune continuă de absorbții și de reemisi spontane ale fotonilor de către atomii, ionii sau moleculele pe care radiația le întâlnește în cale (fig. 8.2.2).

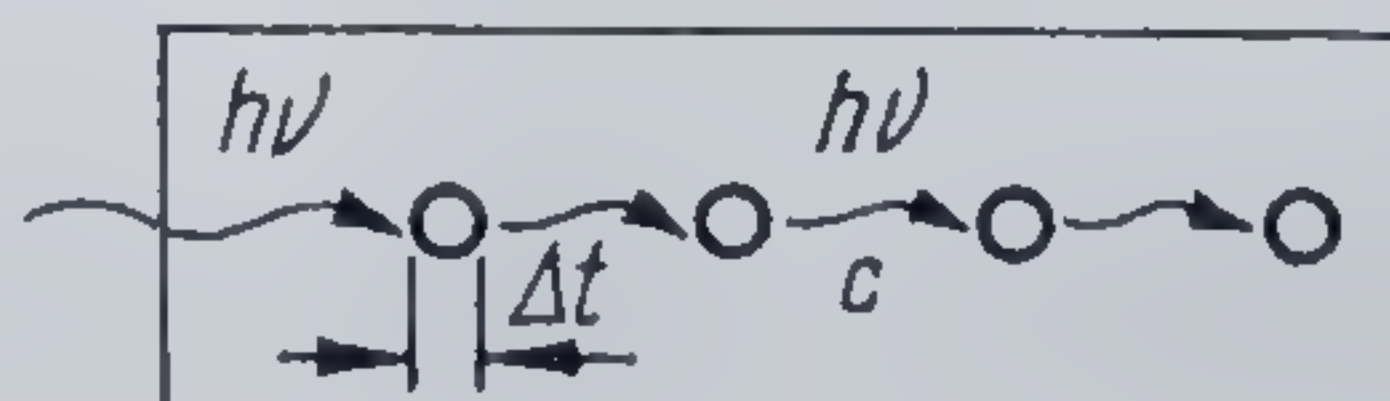


Fig. 8.2.2.

În fiecare act elementar de absorbție și de reemisie, fotonul „dispare” un anumit interval de timp Δt (interval care separă reemisia de absorbție), astfel încît viteza medie cu care fotonul va străbato respectivul mediu va fi mai mică decît c ($v < c$).

În ceea ce privește însă dificultățile de reprezentare intuitivă a naturii luminii, ele rămân de nedepășit dacă se are în vedere faptul că într-o serie de fenomene studiate de optica ondulatorie, cum sînt cele de interferență și de difracție, lumina se manifestă ca o veritabilă undă, în timp ce în efectul fotoelectric ea relevă caracteristici corpusculare. Cele două imagini despre lumină — *imaginea ondulatorie* și *imagine corpusculară* — nu numai că nu se aseamănă între ele ci, în limitele intuiției curente, par a se exclude reciproc. Într-adevăr, putem concepe o undă ca pe un proces continuu, extins în general indefinit pe direcția de propagare a undei, în timp ce corpusculul trebuie conceput ca o entitate limitată, de dimensiuni extrem de mici, localizat într-un anumit loc al spațiului la un anumit moment de timp dat. Lumina și, în general toate radiațiile electromagnetice, producînd atît fenomene specifice ondulatorii (interferență, difracție), cît și fenomene specifice corpusculare (efect fotoelectric) manifestă o natură duală, corpuscular-ondulatorie. Cea mai pregnantă legătură dintre cele două moduri de comportare a radiațiilor electromagnetice este descrisă de relația (8.2.5), care leagă o mărime specific corpusculară, mecanică, și anume impulsul p , de o mărime specific ondulatorie și anume lungimea de undă λ .

8.2.2. EFECTUL COMPTON

Acest efect a fost pus în evidență în anul 1923 de către A. Compton în studiile sale de difuzie a radiațiilor X monocromatice pe medii difuzante metalice. El evidențiază alte aspecte interesante ale comportării corpusculare a fotonilor și anume faptul că acești corpusculi se pot ciocni și semi-elastic cu electronii liberi din metale.

Efectul Compton constă în apariția, în radiația difuzată, a unei componente de lungime de undă λ mai mare decît lungimea de undă λ_0 a radiației X incidente (fig. 8.2.3). Cercetările experimentale au arătat

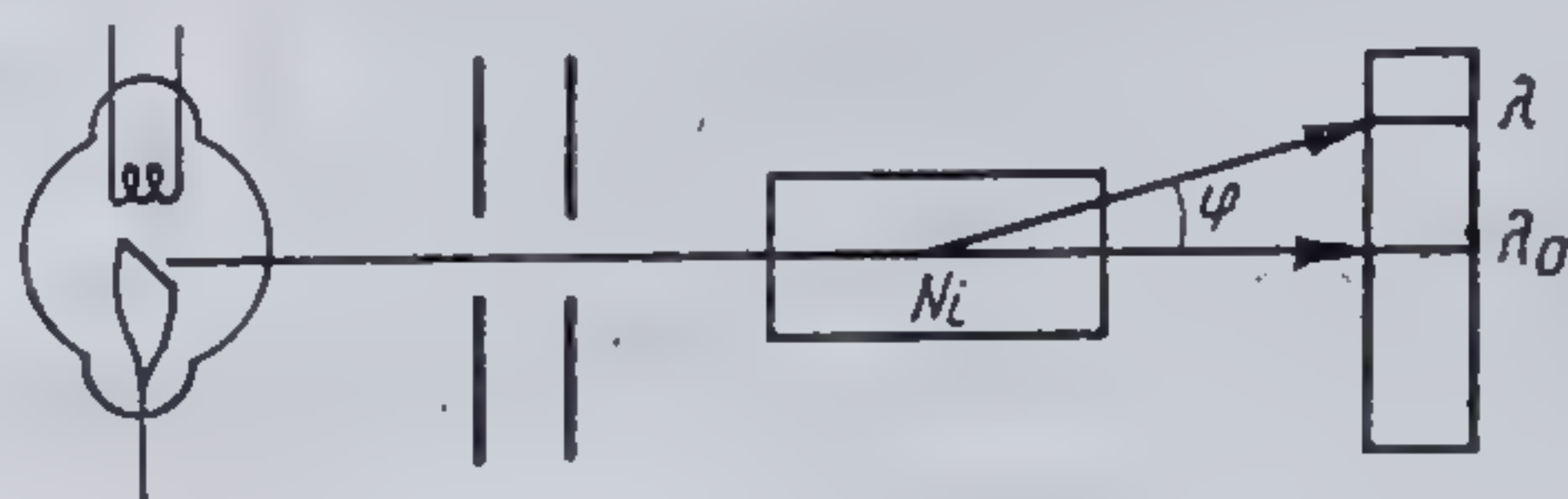


Fig. 8.2.3.

că diferența $\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0$, numită și *deplasare Compton*, depinde numai de unghiul de difuzie φ , nu și de natura mediului difuzant, fiind satisfăcută relația

$$\Delta\lambda = 2\Lambda_0 \sin^2 \frac{\varphi}{2} \quad (8.2.12)$$

în care Λ_0 este o constantă, numită ulterior *lungime de undă Compton a electronului*.

De notat că, și în explicarea legilor efectului Compton, teoriile clasice își arată limitele. Dealtfel, se știe că studiul clasic al fenomenului de difuzie (§ 7.6), bazat pe ideea că undele electromagnetice din fasciculul incident antrenează în mișcări oscilatorii electronii liberi din mediul difuzant metalic — și că în aceste mișcări ei emit radiația difuzată — conduce la concluzia că lungimea de undă a radiațiilor difuzate nu trebuie să depindă de unghiul de difuzie φ . În schimb, teoria fonică, elaborată de Compton pe baza ideii că în cadrul acestui efect intervine o ciocnire semi-elastică între fotonul de radiație X și electronul liber din mediul difuzant conduce imediat la rezultatul (8.2.12). Într-adevăr, în cadrul unei astfel de ciocniri se va conserva atât energia cât și impulsul participanților la ciocnire și, dacă se admite că electronul se află în repaus înainte de ciocnire, atunci cele două legi de conservare se vor scrie sub forma

$$\hbar \mathbf{k}_0 = \hbar \mathbf{k} + m \mathbf{v} \quad (8.2.13)$$

$$\hbar \omega_0 + m_e c^2 = \hbar \omega + m c^2. \quad (8.2.14)$$

Din figura 8.2.4 se vede că se poate scrie: $(mv)^2 = \hbar^2 k_0^2 + \hbar^2 k^2 - 2\hbar^2 k k_0 \cos \varphi$, respectiv cu $|\mathbf{k}_0| = \frac{\omega_0}{c}$ și $|\mathbf{k}| = \omega/c$

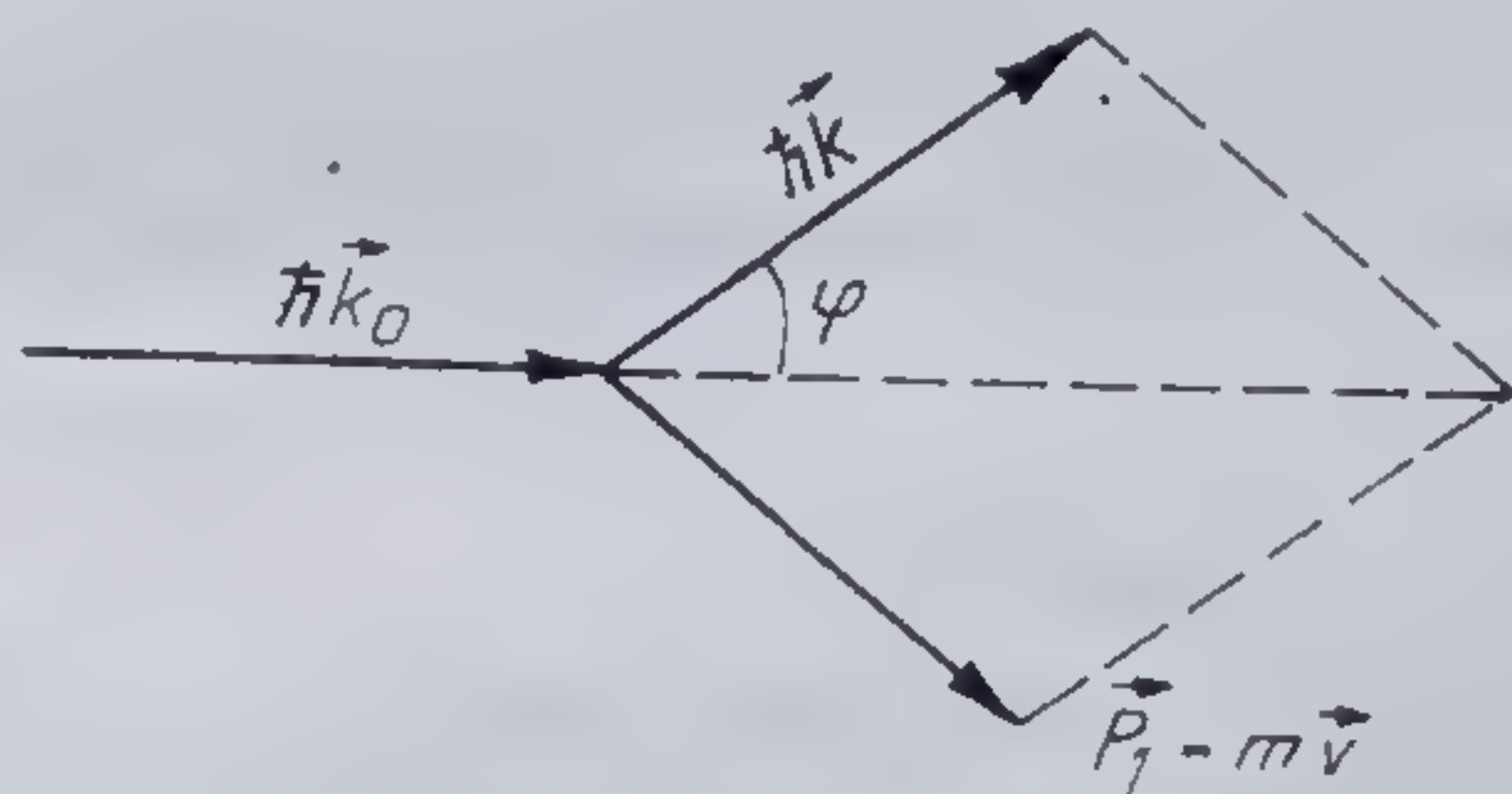


Fig. 8.2.4.

$$(mv)^2 = \left(\frac{\hbar \omega_0}{c} \right)^2 + \left(\frac{\hbar \omega}{c} \right)^2 - 2\hbar^2 \frac{\omega_0 \omega}{c^2} \cos \varphi. \quad (8.2.15)$$

De asemenea, prin scrierea expresiei (8.2.14) sub forma: $mc = m_0 c + \frac{\hbar \omega_0}{c} - \frac{\hbar \omega}{c}$ și ridicarea ei la pătrat, obținem

$$(mc)^2 = (m_e c)^2 + \left(\frac{\hbar \omega_0}{c} \right)^2 + \left(\frac{\hbar \omega}{c} \right)^2 + 2m_e \hbar (\omega_0 - \omega) - \frac{2\hbar^2 \omega_0 \omega}{c^2}. \quad (8.2.16)$$

Scăzînd din această ultimă expresie pe (8.2.15) și avînd în vedere că potrivit relației (8.2.11), $m^2 c^2 (1 - v^2/c^2) = m_e^2 c^2$, rezultă

$$\hbar \omega_0 \omega (1 - \cos \varphi) = m_e c^2 (\omega_0 - \omega). \quad (8.2.17)$$

Cu schimbările : $\omega_0 = 2\pi c/\lambda_0$, $\omega = 2\pi c/\lambda$, $h = h/2\pi$ se obține,

$$\lambda - \lambda_0 = 2 \frac{h}{m_e c} \sin^2 \frac{\varphi}{2} \quad (8.2.18)$$

relație care, cu notația

$$\Lambda_0 = \frac{h}{m_e c} = 0,024 \text{ \AA}, \quad (8.2.19)$$

coincide cu (8.2.12).

De remarcă că lungimea de undă Compton a electronului Λ_0 este definită prin intermediul a trei constante universale : constanta lui Planck $h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$, masa electronului $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ și viteza luminii în vid $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$. Desigur că transferul de energie între foton și electron va fi cu atât mai mare cu cât masa fotonului va fi mai apropiată de valoarea de masa electronului. O astfel de concluzie rezultă și din (8.2.18), întrucât se vede că deplasarea relativă Compton, pentru $\varphi = \pi/2$, este dată de expresia

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} = \frac{\Lambda_0}{\lambda_0} \quad (8.2.20)$$

avînd valoarea de numai $10^{-3} \%$ pentru radiații luminoase ($\lambda_0 = 5000 \text{ \AA}$), dar putînd ajunge la 10% pentru radiațiile X ($\lambda_0 = 10^{-10} \text{ m}$). Rezultă deci că aspectul corpuscular al radiațiilor electromagnetice devine cu atât mai pregnant cu cât lungimea lor de undă este mai mică.

Intensitatea efectului Compton poate fi descrisă printr-o *secțiune eficace*, de tipul celei definite în §1.8. Calculele făcute în cadrul teoriei cuantice a câmpului [64], folosind ipoteza că la baza procesului stau interacțiunile de tip electromagnetic dintre foton și electron (vezi și §12.10), conduc la o expresie de forma :

$$\frac{d\sigma_c}{d\Omega} = \frac{e^2}{8\pi m_e c^2 \epsilon_0} \left(\frac{k}{k_0} \right)^2 \left(\frac{k_0}{k} + \frac{k}{k_0} - \sin^2 \varphi \right). \quad (8.2.21)$$

Prin integrarea acestei expresii în raport cu unghiul φ se obține :

$$\sigma_c(x) = \frac{3e^2}{32m_e c^2 \epsilon_0} \left\{ \frac{1+x}{x^2} \left[\frac{2x(1+x)}{1+2x} - \ln(1+2x) \right] - \frac{1}{2x} \ln(1+x) - \frac{1+3x}{(1+2x)} \right\} \quad (8.2.22)$$

în care s-a folosit notația $x = \frac{h\omega}{m_e c^2}$. De remarcă că o astfel de expresie pune în evidență o scădere treptată a secțiunii eficace $\sigma_c(x)$ odată cu

creșterea energiei $\hbar\omega$ a fotonilor (fig. 8.2.5), efectul Compton devenind practic neglijabil la energii $\hbar\omega > 5$ MeV — rezultat bine verificat de experiență.

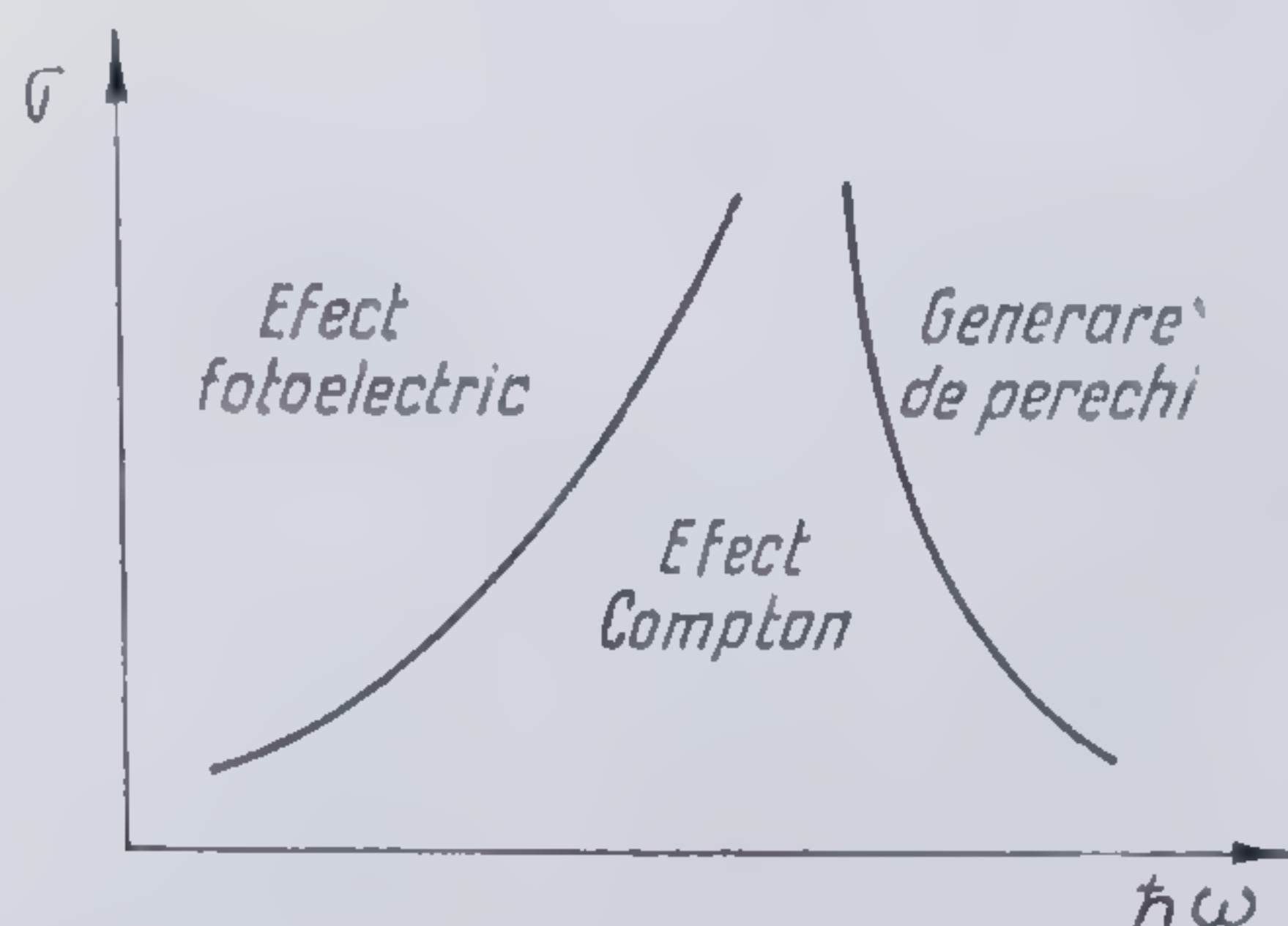


Fig. 8.2.5.

În sfârșit, să mai notăm că la trecerea fotonilor prin medii difuzante metalice pot interveni difuzii Compton succesive, la studiul unui astfel de efect Compton multiplu aducînd contribuții de seamă fizicianul român H. Hulubei.

8.2.3. PRESIUNEA LUMINII ȘI FLUCTUAȚIILE LUMINII

Aspectul corpuscular al luminii trebuie să se releve și în fenomenele de masă, la care participă un număr mare de fotoni, cum sînt reflexia și absorbția luminii pe suprafețele corpurilor. Întrucît suprafețele vor prelua o parte din impulsul fotonilor incidenti (în conformitate cu legea conservării impulsului), ele vor fi supuse acțiunii unor presiuni din partea radiației. Este interesant de remarcat că și în teoria electromagnetică clasică s-a calculat o astfel de presiune, ajungîndu-se la expresia

$$p = \frac{I}{c}(1 + R) \quad (8.2.23)$$

în care I reprezintă intensitatea fasciculului de radiație incidentă, iar R — coeficientul de reflexie al suprafeței. Faptul că, potrivit acestei expresii, presiunea p_R , pe o suprafață perfect reflectătoare ($R = 1$) este de două ori mai mare decît pe una absorbantă ($R \simeq 0$) a sugerat punerea ei în evidență printr-o experiență, rămasă celebră (P. N. Lebedev, 1900). Într-o incintă de sticlă vidată A (fig. 8.2.6), de un fir subțire de torsionare BC se suspendă un sistem D , format din mai multe aripioare metalice, dispuse simetric față de firul de suspensie. Fiecare aripioară are o față perfect reflectătoare, iar cealaltă — perfect absorbantă. Sistemul format dintr-o oglindă mică F fixată pe axul de torsionare, raza de lumină SFE și ecranul cu scala E (sistem Ponghedorf) vizualizează, prin

deplasarea spotului luminos pe o scală, unghiul de rotire al firului de torsiune.

S-a constatat că prin iluminarea sistemului se obține o deviație a spotului luminos E , care este cu atât mai mare cu cât intensitatea I a fascicului de lumină este mai mare, așa cum prevede relația (8.2.23), (la presiuni $p > 10^{-3}$ torr, sistemul se va roti invers datorită ciocnirilor moleculare).

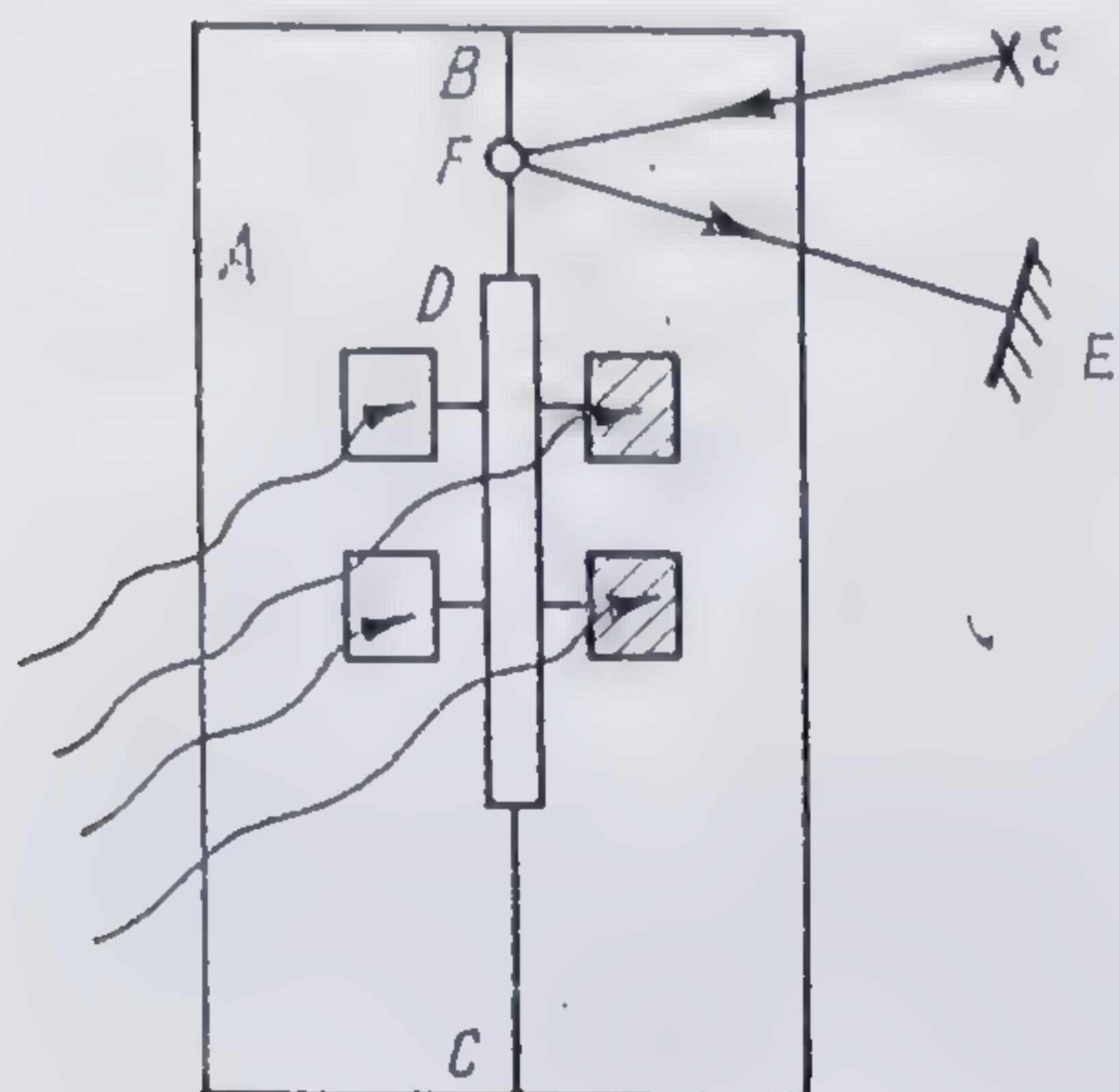


Fig. 8.2.6.

Dar la un rezultat identic cu cel exprimat de relația (8.2.23) conduce și teoria fonică a presiunii luminii. Într-adevăr, dacă se notează prin n_0 numărul de fotoni incidenti pe unitatea de suprafață în unitatea de timp, atunci întrucât dintre aceștia, un număr

$$n_R = Rn_0. \quad (8.2.24)$$

vor fi reflectați de suprafață și vor exercita pe aceasta o presiune

$$p_R = 2n_R \frac{\hbar\omega}{c} = 2n_0 R \frac{\hbar\omega}{c} \quad (8.2.25)$$

iar restul de fotoni, $n_a = n_0 - Rn_0 = n_0(1 - R)$ vor fi absorbiți și vor exercita presiunea

$$p_a = n_a \frac{\hbar\omega}{c} = n_0(1 - R) \frac{\hbar\omega}{c}, \quad (8.2.26)$$

presiunea totală va fi

$$p = p_R + p_a = \frac{n_0 \hbar\omega}{c} (1 + R). \quad (8.2.27)$$

Această expresie este identică cu (8.2.23), avînd în vedere că $n_0 \hbar\omega = I$ reprezintă tocmai intensitatea fascicului incident.

Rezultatul de mai sus prezintă și interes principal, deoarece el atestă faptul că în procesele la care participă un număr mare de fotoni, teoriile ondulatorii (clasice) și cele fotonice (cuantice) conduc la rezultate identice. Desigur, teoriile clasice au în vedere valori medii așa cum s-a menționat în §7.2 și din cele de mai sus se poate desprinde un principiu general — *principiul de corespondență* —, care stipulează că valorile medii ale caracteristicilor fotonice sînt identice cu cele ondulatorii.

Să mai notăm, în încheiere, că prin experimente directe au fost puse în evidență *fluctuațiile de lumină*, faptul că intensitatea unui fascicul de lumină prezintă fluctuații (S. I. Vavilov, 1900). Aceste fluctuații ne arată că pentru radiațiile de echilibru termic avem de-a face cu un sistem de fotoni cu comportament statistic. Toate acestea au scos în evidență cu pregnanță existența reală a fotonilor și a comportamentului lor me-

canic, reamintind astfel, desigur pe un alt plan, de vechea concepție mecanicistă a lui Newton privitoare la „particulele” de lumină. Numai că existența fenomenelor specifice ondulatorii (care nu pot fi explicate într-un limbaj pur mecanic) ne obligă să acceptăm că fotonii descriu doar unul dintre modurile de comportare ale luminii, celălalt fiind cel ondulatoriu. Prin urmare, lumina (și în general, toate radiațiile electromagnetice), nu este nici pur corpusculară, nici pur ondulatorie ci mai degrabă are câte ceva din caracteristicile contradictorii ale acestor două moduri, fiind, după expresia lui A. Kastler [54], un „onduscul”, care înglobează dualitatea undă-corpusul.

§ 8.3. DUALITATEA UNDĂ-CORPUSCUL LA ELECTRON (NOTIUNI DE OPTICĂ ELECTRONICĂ)

8.3.1. UNDA ASOCIATĂ MICROPARTICULELOR

Timp de aproape două decenii, dualitatea undă-corpusul a fost privită ca fiind un mod specific și ciudat de manifestare a fenomenelor luminoase. În anul 1923, Louis de Broglie încearcă să extindă ideia de dualitate și la microparticulele cu masă de repaus nenulă (electroni, protoni etc.). Cu toate dificultățile de interpretare pe care le implică o astfel de extindere, ideia lui de Broglie s-a dovedit ulterior a fi întemeiată.

Conceptul de bază formulat de către de Broglie este cel de *undă asociată unei microparticule* (denumită uneori și undă de Broglie). Potrivit acestuia oricărei microparticule trebuie să i se asocieze o undă. O astfel de undă este concepută ca fiind staționară în raport cu sistemul de referință propriu al microparticulei, putând fi descrisă printr-o funcție de undă de tipul

$$\psi(t') = \psi_0 e^{-i\omega' t'}. \quad (8.3.1)$$

Pulsația de vibrație ω' a acestei unde este determinată de energia de repaus a microparticulei

$$\hbar\omega' = m_0 c^2. \quad (8.3.2)$$

Desigur că descrierea unei astfel de unde asociată într-un sistem de referință inerțial nepropriu, față de care microparticula se deplasează cu viteza v în lungul axei Ox , va trebui să se facă în conformitate cu principiile relativității restrânse, respectiv cu formulele de transformare Lorentz (3.4.17)

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad t' = \frac{t - \frac{v}{c^2} x}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (8.3.3)$$

și a relației (6.10.102)

$$\omega = \frac{\omega'}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (8.3.4)$$

Se va obține atunci o funcție de undă de forma

$$\psi(x, y, z, t) = \psi_0 e^{-i \left(\frac{\omega' t}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - \frac{\omega' x \cdot v/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \right)} \quad (8.3.5)$$

care poate fi scrisă astfel :

$$\psi(x, y, z, t) = \psi_0 e^{-i\omega(t - x/v_f)}. \quad (8.3.6)$$

În această ultimă expresie, prin v_f s-a notat viteza de fază a undei progresive ce rezultă, în raport cu un sistem de referință inerțial presupus fix, egală cu

$$v_f = \frac{c^2}{v}. \quad (8.3.7)$$

Trebuie remarcat că prin construirea în acest mod a funcției de undă ψ , relația (8.2.4) își păstrează valabilitatea, deoarece cu (8.3.4) avem

$$\hbar\omega = \frac{\hbar\omega'}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = mc^2 \quad (8.3.8)$$

De asemenea, va rămâne valabilă și relația (8.2.6), care leagă impulsul p al electronului de vectorul de undă k , întrucît

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\omega}{v_f} \quad (8.3.9)$$

respectiv cu (8.3.4) și (8.3.7)

$$k = \frac{\omega' v}{c^2 \sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (8.3.10)$$

Ținînd cont și de relația (8.3.2), obținem

$$k = \frac{m_0 v}{\hbar \sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (8.3.11)$$

care, cu formula relativistă a impulsului (3.6.10), ia forma

$$p = \hbar k. \quad (8.3.12)$$

Se regăsește astfel celebra formulă

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \quad (8.3.13)$$

care leagă, prin intermediul constantei lui Planck, comportarea ondulatorie a particulei (descrișă prin λ) de comportarea ei corpusculară (descrișă prin p). Nu trebuie uitat însă că la această concluzie se ajunge prin utilizarea relației (8.3.7) care, așa cum se vede, introduce pentru unda asociată o viteză de fază $v_f > c$ (întrucît $v < c$). În același timp, pentru o microparticulă aflată în mișcare liberă ($v = \text{const.}$), unda asociată trebuie să fie o undă plană și monocromatică. Dar, în acest fel se reintroduce din nou aspectul contradictoriu al celor două imagini: undă plană extinsă indefinit în lungul direcției de mișcare a microparticulei și existența acestei microparticule într-un punct al traiectoriei sale.

Pentru depășirea dificultăților semnalate mai sus, undele asociate au fost concepute ulterior ca *unde de grup* (§6.10.4), de tipul celor ce iau naștere la propagarea luminii în medii dispersive. Se știe (§6.10.4) că viteza de propagare a grupului de unde v_g este dată de (6.10.53), adică de expresia

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}. \quad (8.3.14)$$

Dacă se notează $E = \hbar\omega$ și se ține cont de (8.3.12), atunci

$$v_g = \frac{d(E/\hbar)}{d(p/\hbar)} = \frac{dE}{dp} = \frac{d(p^2/2m_0)}{dp} = v \quad (8.3.15)$$

rezultat care ne spune că viteza de grup este egală cu viteza microparticulei. Pe baza acestui rezultat s-a formulat ipoteza „unde de grup pilotante” (fig. 8.3.1), potrivit căreia unda asociată se deplasează odată cu microparticula, „pilotînd” (sau ghidînd) mișcarea acesteia.

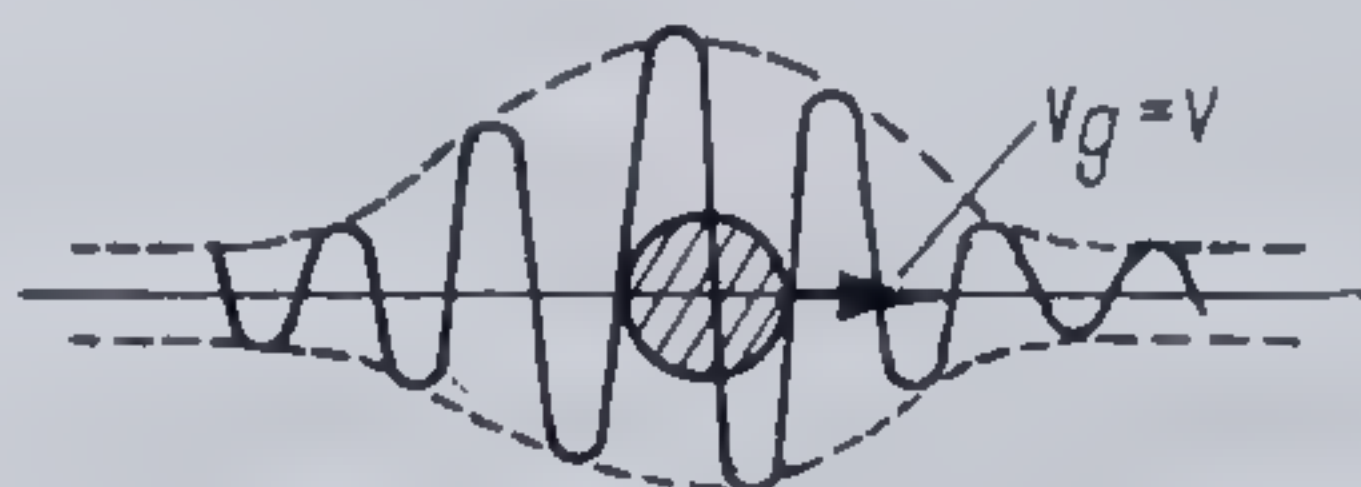


Fig. 8.3.1.

Dar și în cazul unei astfel de imagini intervin dificultăți legate mai ales de imposibilitatea de a localiza exact, în spațiu și timp, microparticula. Studiul acestui aspect al problemei a condus la formularea celebrelor *relații de nedeterminare ale lui Heisenberg*.

8.3.2. RELAȚIILE DE NEDETERMINARE ALE LUI HEISENBERG

În §6.10.4 s-a arătat că unda de grup se obține prin suprapunerea mai multor unde plane și monocromatice, de frecvențe și lungimi de undă apropiate între ele. S-a văzut că dacă pulsațiile ω ale acestor unde sînt

cuprinse în intervalul $\Delta\omega$ (de o parte și de alta a lui ω_0), atunci vor lua naștere pachete de undă cu extinderea temporală Δt , legată de $\Delta\omega$ prin relația

$$\Delta\omega \Delta t \geq 2\pi \quad (8.3.16)$$

și extinderea spațială Δx , legată de Δk prin relația

$$\Delta k \Delta x \geq 2\pi. \quad (8.3.17)$$

Aceste două relații, obținute încă la începutul secolului XIX de către Fourier, în cadrul studiului analitic al funcțiilor armonice, au un caracter cu totul general, fiind cunoscute sub denumirea de „relații ale lui Fourier”.

Ce semnificație fizică au însă aceste relații, privite în contextul dualității undă-corpusecul? La o astfel de întrebare a dat răspuns W. Heisenberg, al cărui studiu, făcut în cu totul alt context (vezi § 8.7), a condus la stabilirea unor relații, cunoscute astăzi sub denumirea de *relații de nedeterminare*. Formal, aceste relații pot fi obținute din relațiile lui Fourier (8.3.16) și (8.3.17), punînd $\Delta k = \Delta p_x / \hbar$. Se va obține

$$\Delta p_x \Delta x \geq \hbar, \quad \Delta p_y \Delta y \geq \hbar, \quad \Delta p_z \Delta z \geq \hbar \quad (8.3.18)$$

și respectiv cu $\Delta\omega = \Delta E / \hbar$

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar. \quad (8.3.19)$$

De remarcă că aceste relații de nedeterminare Heisenberg leagă nedeterminările Δx , Δy , Δz ale poziției unei microparticule, de nedeterminările Δp_x , Δp_y , Δp_z ale componentelor impulsului acesteia, respectiv lărgimea energetică ΔE a unei stări energetice, de durată Δt a acestei stări. De exemplu, în cazul unui electron nerelativist, localizat în intervalul dintre două noduri ale unei rețele metalice ($\Delta x \approx 4 \text{ \AA}$), din (8.3.17) rezultă o nedeterminare a vitezei electronului $\Delta v = \frac{\hbar}{m_e \Delta x} = 2 \cdot 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}}$,

care este de ordinul de mărime al valorii medii a vitezelor electronice din metale. În schimb, pentru un firicel de praf, de numai 10^{-9} kg , la o localizare de ordinul unui micron ($\Delta x = 10^{-6} \text{ m}$) rezultă o nedeterminare a vitezei cu totul neglijabilă, de ordinul $\Delta v \approx 10^{-20} \text{ m/s}$.

Din cele de mai sus rezultă că la nivel microcosmic există perechi de *variabile dinamice* ale căror valori nu pot fi stabilite concomitent, cu o precizie oricît de mare. Aceste perechi de mărimi, numite *complementare*, sînt selectate, în general, prin condiția ca dimensiunea produsului lor să fie egală cu a unei acțiuni mecanice (energie \times timp). Desigur că o astfel de concluzie a suscitat multiple dispute pe plan filozofic și conceptual, dispute care mai continuă și astăzi [12, 31, 77]. Cu toate acestea, relațiile de nedeterminare n-au putut fi evitate, nici după ce s-a constatat că imaginea semiclassicală a undelor de grup — ca unde asociate microparticulelor — nu poate fi menținută, datorită altor considerente și anume se constată că pachetul undei de grup asociat unei microparticule se destramă aproape instantaneu, datorită dispersiei ce intervine în timpul

propagării. Acest proces se produce cu atât mai repede cu cât este mai mică masa microparticulei.

Într-adevăr, dacă din legea de dispersie (6.10.56) se ia în calcule și termenul de ordinul doi $\left(\frac{d^2k}{d\omega^2}\right)$, atunci avînd în vedere că în cazul electronului nerelativist se poate scrie

$$-\frac{\partial^2 k}{\partial \omega^2} = \left[h \frac{\partial^2 E}{\partial p^2} \right]^{-1} = \frac{m_e}{h} \quad (8.3.20)$$

pentru intervalul Δt se va obține relația

$$\Delta t \simeq \frac{2\pi}{(\Delta k)^2} \cdot \frac{\partial^2 k}{\partial \omega^2} = \frac{m_e(\Delta x)^2}{h} \quad (8.3.21)$$

Înseamnă că pentru $\Delta x = 1 \text{ \AA}$ va rezulta un $\Delta t \simeq 10^{-23} \text{ s}$, interval situat la limita inferioară a intervalelor temporale cu semnificație fizică certă (vezi și §12.3). Rezultă deci că pachetul de unde asociat electronului s-ar destrăma practic instantaneu, deși electronul are o existență nelimitată în timp, fiind o particulă stabilă — un rezultat evident contradictoriu.

8.3.3. DOVEZI EXPERIMENTALE PRIVIND EXISTENȚA UNDELOR ASOCIATE MICROPARTICULELOR

Dificultățile de interpretare semnalate mai sus nu au determinat abandonarea conceptului de dualitate undă-corpusul, deoarece în anul 1925 Davisson și Germer au pus în evidență, prin experiențe de difracție a electronilor pe rețele cristaline, realitatea comportamentului ondulatoriu al acestora. Schema unui astfel de experiment este prezentată în figura 8.3.2. Un tun electronic T , însoțit de mai multe diafragme de coli-

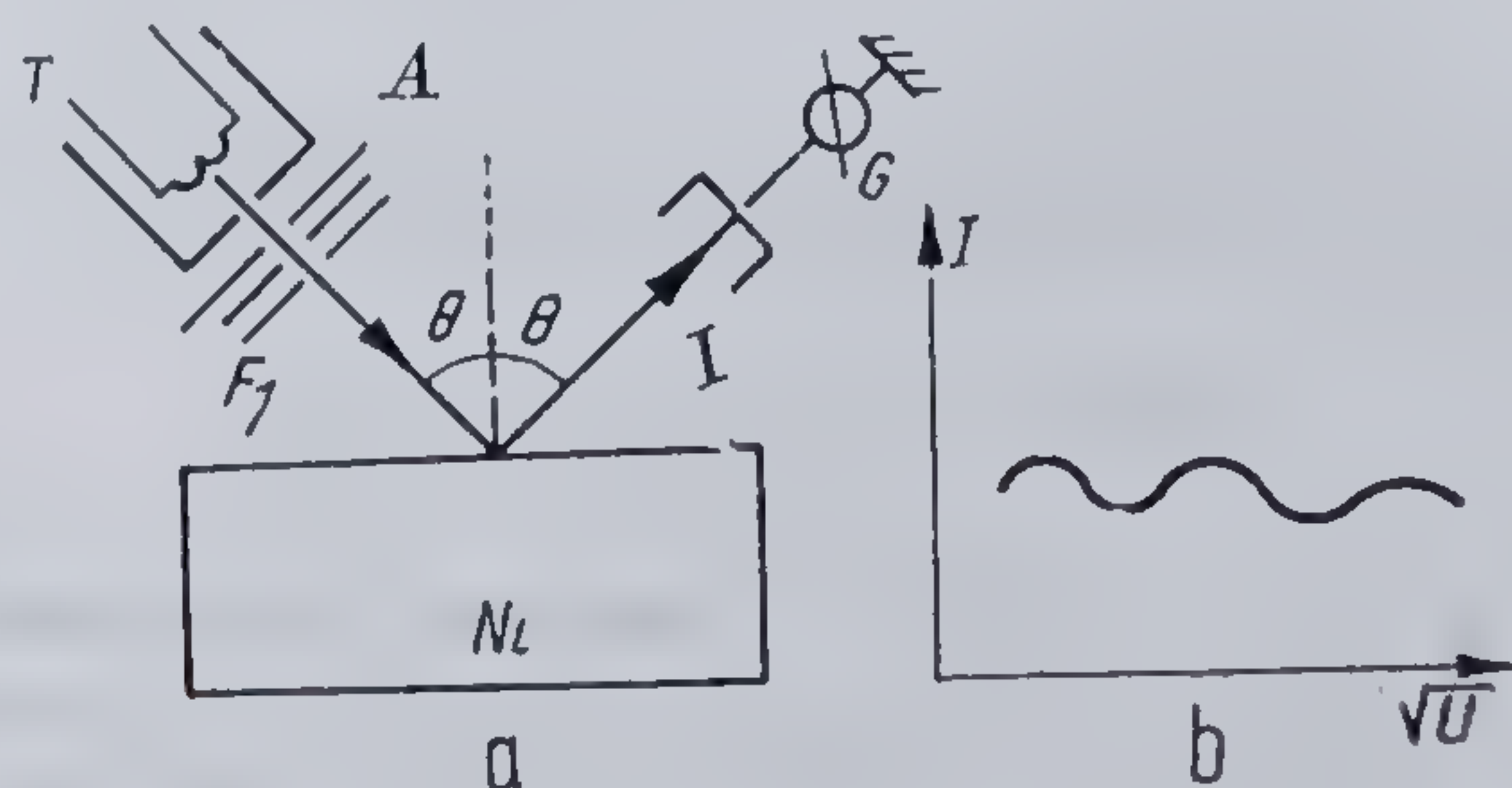


Fig. 8.3.2.

mare F_1 și de anodul de accelerare A trimite pe suprafața plană a unui monocristal de Ni un fascicul monoenergetic de electroni, sub un unghi de incidență θ . Fasciculul reflectat este cules cu ajutorul unei cuști Faraday, iar curentul de electroni I este măsurat cu un galvanometru G .

S-a obținut o variație periodică a intensității I a curentului de electroni reflectați, funcție de \sqrt{U} , așa cum se vede pe figura 8.3.2, b, U fiind tensiunea de accelerare.

Experiențele au arătat că dacă în locul cuștii Faraday se așază o placă fotografică, atunci pe aceasta se obțin franje de difracție, electronii reflectați de către rețeaua de difracție ajungând numai în acele locuri ale plăcii pentru care este satisfăcută relația de tip Bragg (7.4.36), adică

$$2d \cos \theta = n\lambda; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (8.3.22)$$

Aici d este constanta rețelei cristaline cubice de Ni, iar λ lungimea de undă a undei asociate electronului. Întrucât pentru electronii accelerați de tensiunea U

$$\frac{m_e v^2}{2} = eU \quad (8.3.23)$$

lungimea de undă λ a undei lor asociate va fi dată de expresia

$$\lambda = \frac{h}{m_e v} = \sqrt{\frac{h^2}{2em_e}} \cdot \frac{1}{\sqrt{U}} \quad (8.3.24)$$

respectiv de

$$\lambda[\text{\AA}] = \frac{12,25}{\sqrt{U[\text{V}]}} \quad (8.3.25)$$

Rezultă din această expresie că $\lambda = 1 \text{ \AA}$ pentru electroni accelerați de tensiunea $U = 150 \text{ V}$ și $\lambda = 0,1 \text{ \AA}$ pentru $U = 15 \text{ kV}$. Aceste valori pentru λ sînt de același ordin de mărime cu cele ale lungimilor de undă ale radiațiilor X. Din acest motiv și fenomenele de difracție produse de electroni sînt întrutotul asemănătoare celor produse de radiațiile X, ambele fiind guvernate de aceeași lege (formula Bragg (8.3.22)).

Dependența periodică a lui I de \sqrt{U} se obține, în aceste condiții, imediat din relațiile (8.3.25) și (8.3.22). Se observă că

$$2d \cos \theta = \frac{12,25 \cdot 10^{-10}}{\sqrt{U}} n \quad (8.3.26)$$

din care rezultă, pentru $\theta = 60^\circ$, că reflexiile Bragg se produc numai atunci cînd $\sqrt{U} = 12,25 \cdot 10^{-10} n/d$ ($n = 0,1, 2, \dots$) Ulterior, Stern și Esterman au extins experiențele de difracție la protoni, neutroni, particule α și chiar la atomi neutri de H și He. Au fost reproduse, de asemenea, experiențele de interferență cu dispozitivul Young (fig. 7.3.5), utilizîndu-se în loc de lumină microparticule. Un mod ingenios de a pune în evidență comportarea ondulatorie a electronilor a fost conceput și realizat de către Thomson și Tartakovski. Ei au folosit tehnica difuziei electro-

nilor pe straturi subțiri metalice policristaline (fig. 8.3.3) și au obținut imagini de difracție circulare. Desigur că, în acest caz, reflexiile Bragg se vor produce pe acele plane reticulare pentru care este satisfăcută condiția

$$2d \sin \varphi = n\lambda; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (8.3.27)$$

Se observă că electronii difuzați formează fascicule conice, cu deschiderea egală cu 4φ , care vor intersecta ecranul P după cercuri de rază R , pentru care (având în vedere că φ este mic) se poate scrie

$$\operatorname{tg} 2\varphi = \frac{R}{L} \simeq \sin 2\varphi \simeq 2 \sin \varphi = 2 \cdot \frac{12,25 \cdot 10^{-10}}{\sqrt{U}} n.$$

Din această relație rezultă condiția

$$R\sqrt{U} = \text{const.} \quad (8.3.28)$$

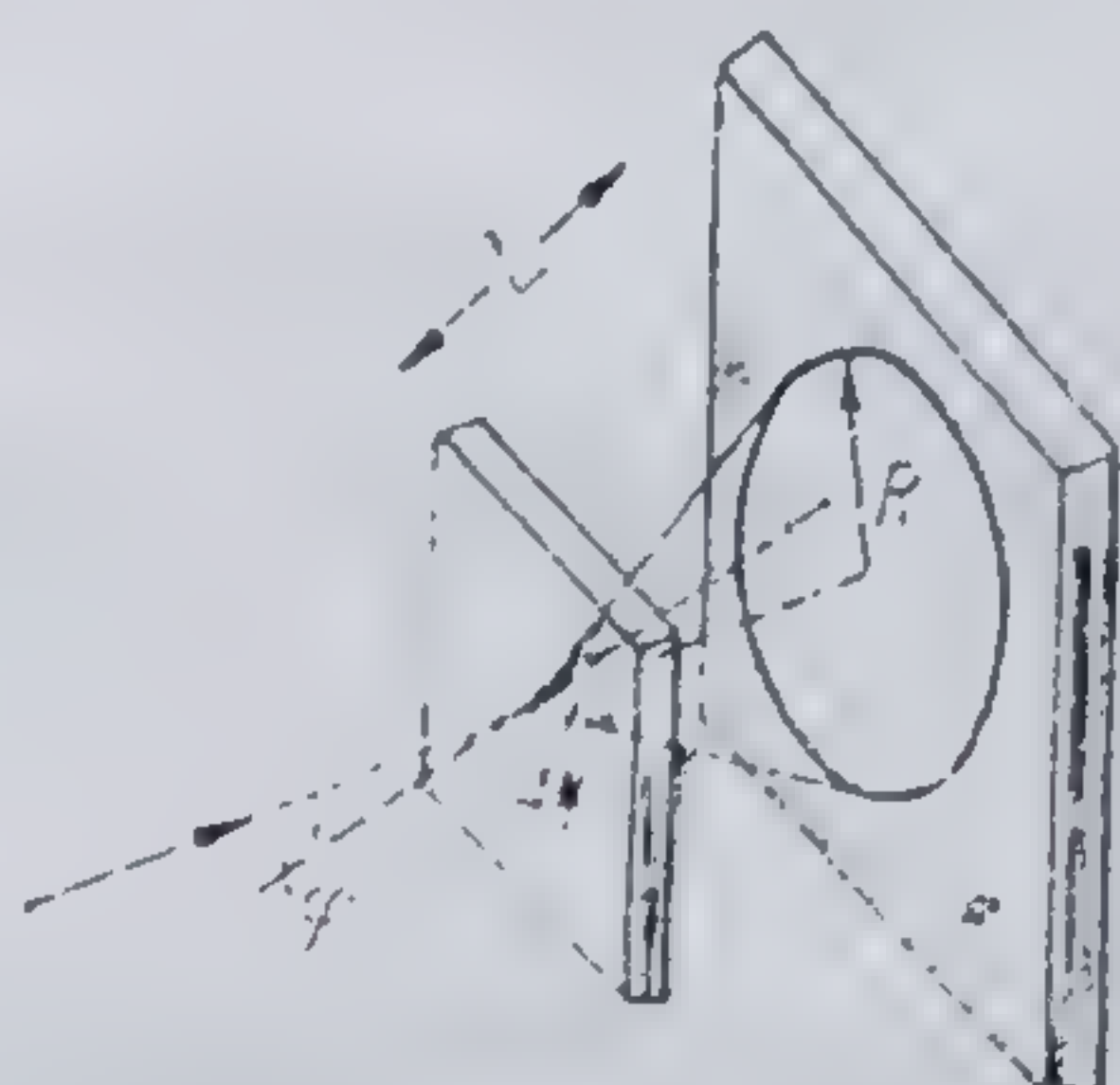


Fig. 8.3.3.

care a fost verificată cu mare exactitate de către experiență.

Desigur, astăzi nu mai există dubii cu privire la realitatea comportamentului ondulatoriu al microparticulelor, difracțiile de electroni sau neutroni fiind, ca fenomene specifice ondulatoriu, tehnici curențe de studiu al structurilor cristaline (vezi §11.2). Posibilitățile practice pe care le oferă utilizarea comportamentului ondulatoriu al microparticulelor și îndeosebi al electronilor au condus la dezvoltarea unui nou capitol al opticii, cunoscut sub denumirea de *optică electronică*.

8.3.4. NOȚIUNI DE OPTICĂ ELECTRONICĂ

Optica electronică studiază traiectoriile (razele) pe care le descriu fasciculele de electroni în câmpuri electrice și magnetice de diverse structuri, precum și imaginile pe care aceste fascicule le realizează pe ecrane de vizualizare, tuburi catodice, microscopice electronice etc. Studiile se pot face în diverse aproximații, una dintre acestea fiind aproximația *opticii electronice geometrice*, în care se neglijează comportamentul ondulatoriu al electronilor.

Optica electronică geometrică operează cu noțiunea de *rază electronică*, introdusă prin analogie cu raza de lumină (§7.8). Mersul razelor electronice în câmpuri electrice și magnetice se poate calcula cu ajutorul *principiului lui Fermat — al drumului optic minim*.

Familiar în optica fonică, acest principiu se formulează pe baza altei analogii, semnalate deja, între optica geometrică și mecanica clasică, apărând în acest context ca un corespondent al minimei acțiuni din me-

canică (§1.6). Pentru un electron nerelativist, accelerat de un câmp electrostatic de potențial $\varphi(\mathbf{r})$, avem

$$\frac{m_e v^2}{2} = e\varphi(\mathbf{r}). \quad (8.329)$$

Desigur că în acest caz, acțiunea mecanică $d\mathcal{S}$ va fi dată de expresia

$$d\mathcal{S} = \frac{m_e v^2}{2} dt = \frac{m_e}{2} \left(\frac{2e}{m_e} \cdot \varphi(\mathbf{r}) \right)^{1/2} ds$$

asa încît principiul minimei acțiuni se va exprima sub forma

$$\delta \left[\int \varphi^{1/2}(\mathbf{r}) ds \right] = 0. \quad (8.330)$$

Se observă că pentru a păstra analogia cu noțiunea de drum optic, definit prin relația (7.8.5), adică

$$l(\mathbf{r}) = n(\mathbf{r}) s(\mathbf{r}) \quad (8.331)$$

va trebui să luăm, în cadrul opticii electronice, pentru indicele de refracție $n(\mathbf{r})$ expresia

$$n(\mathbf{r}) = [\varphi(\mathbf{r})]^{1/2}. \quad (8.332)$$

Desigur că, în acest caz, refracția razelor electronice va interveni la limita de separație a două câmpuri de potențiale $\varphi(\mathbf{r})$ diferite, fiind satisfăcută următoarea lege de refracție

$$\sqrt{\varphi_1} \sin i = \sqrt{\varphi_2} \sin r. \quad (8.333)$$

Rezultă, din cele de mai sus, că prin alegerea unor configurații de câmp adecvate se pot obține sisteme în care fasciculele de electroni să descrie traiectorii dinainte stabilite. Astfel de sisteme constituie, prin urmare, dioptri electronici, lentile electronice, prisme etc. În figura 8.3.4 este

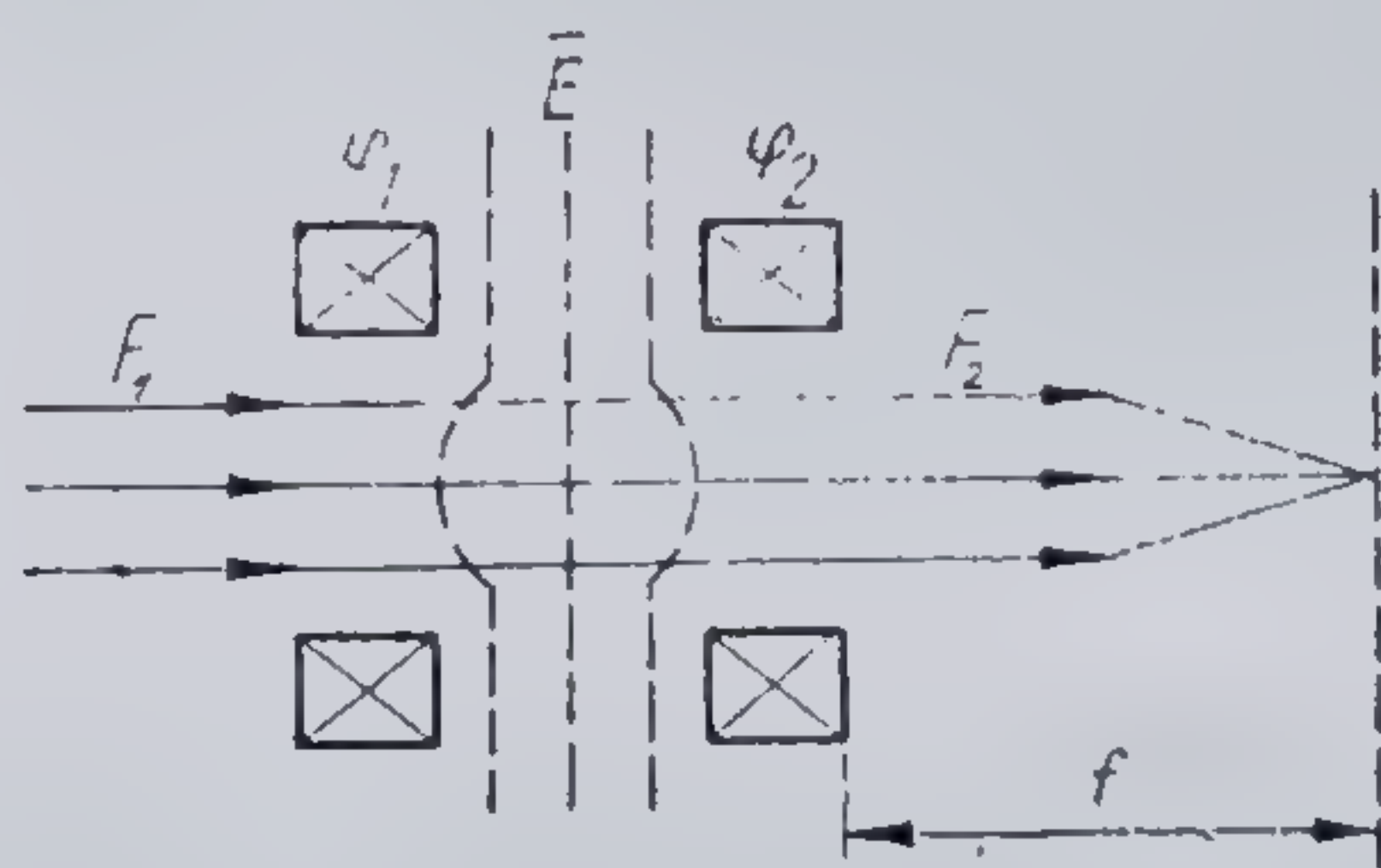


Fig. 8.3.4.

schițată o lentilă electrostatică subțire, în care cele două diafragme F_1 și F_2 , aflîndu-se la potențiale φ_1 și φ_2 diferite, asigură o anumită dispersie câmpului electrostatic, în așa fel încît fasciculul paralel de electroni ce cade perpendicular pe planul diafragmelor va fi focalizat la distanța f

de sistem, distanță nunită distanța focală a lentilei. Există atât lentile electrice, cât și lentile magnetice, ultimele fiind realizate de bobine străbătute de curenți electrice. Cu ajutorul lor au fost realizate sisteme optice electronice complexe, cum sînt microscopul electronic de mare putere de rezoluție*. Performanțele acestor instrumente se datorează faptului că electronii pot fi accelerați în așa fel încît lungimea de undă λ a undei lor asociate să fie sub 1 Å (pentru care fenomenele de difracție intervin numai la dimensiuni sub 1 Å).

Cu ajutorul microscopelor electronice moderne, a căror putere de rezoluție este de ordinul a 2—3 Å, s-au putut pune în evidență nodurile ionice ale structurilor cristaline.

8.3.5. MODELUL BOHR AL ATOMULUI

În acest paragraf vom arăta că ideea de undă asociată a înregistrat succese nu numai în explicarea fenomenelor de difracție ale electronilor. Teoria lui de Broglie s-a dovedit a fi mult mai cuprinzătoare, reușindu-se ca în cadrul ei să se explice modelul atomic al lui Bohr, prin simpla presupunere că stărilor staționare le corespund unde de Broglie staționare, respectiv că pe orbitele Bohr încap numai un număr întreg de lungimi de undă asociate (fig. 8.3.5). Se observă că pe baza unei astfel de ipoteze se obține

$$\frac{2\pi r_n}{\lambda} = n; \quad n = 1, 2, \dots \quad (8.3.34)$$

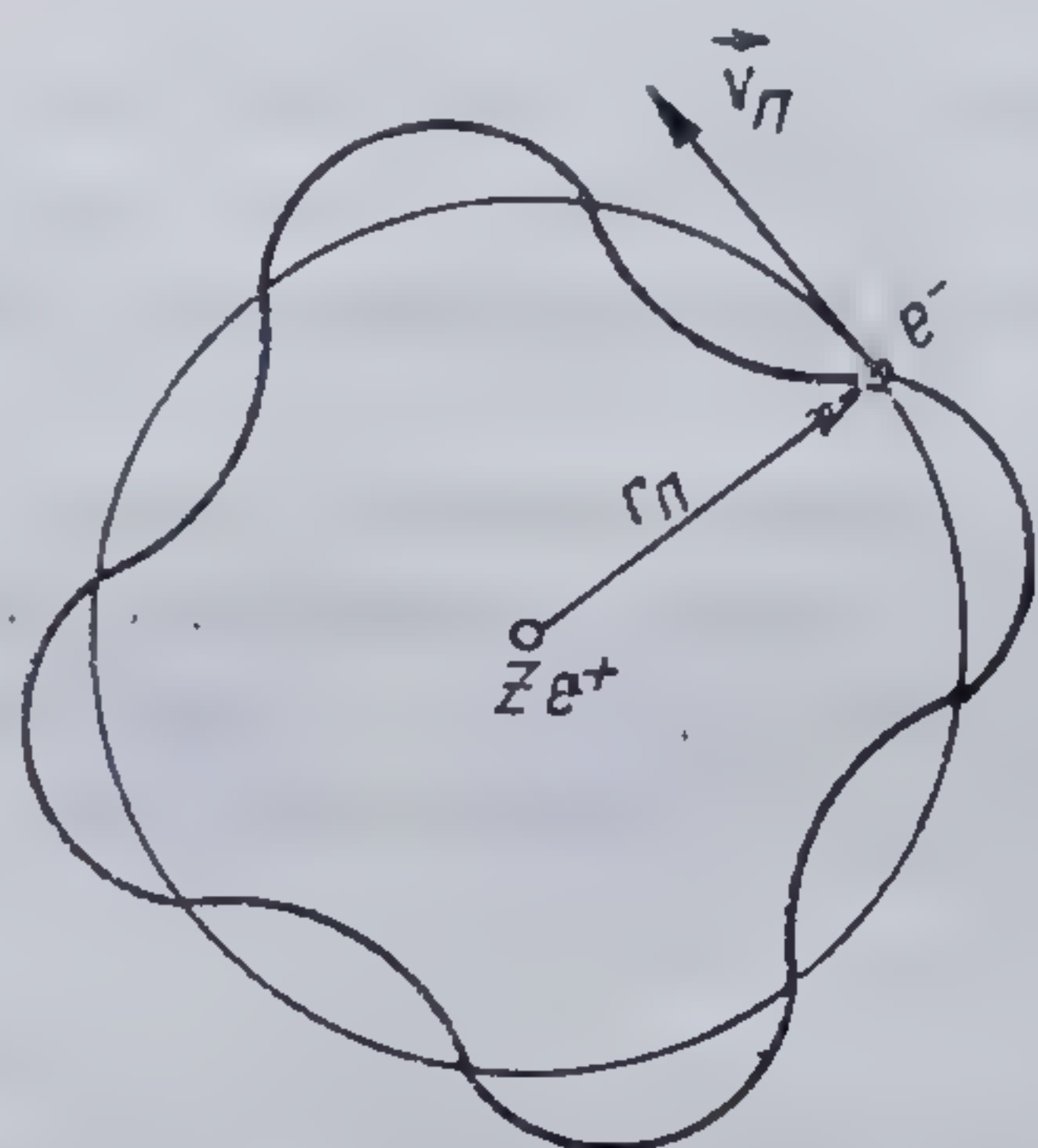


Fig. 8.3.5.

relație care, cu (8.3.13), ia forma

$$\frac{2\pi r_n m_e v_n}{h} = n \quad (8.3.35)$$

* Prin putere de rezoluție se înțelege distanța minimă dintre două puncte de pe obiect care mai pot fi distinse separat.

Avînd în vedere că $p_n = m_e v_n$ reprezintă impulsul electronului, din (8.3.34) rezultă :

$$p_n r_n = n\hbar \quad (8.3.36)$$

care, scrisă sub forma generală

$$\oint p_q dq = n\hbar \quad (8.3.37)$$

(cu p_q — impulsul generalizat, corespunzător coordonatei generalizate q) exprimă tocmai condiția de *cuantificare*, introdusă ad-hoc de către N. Bohr. Prin adăugarea la (8.3.36), a egalității dintre forța coulombiană și forța centrifugă

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} = \frac{m_e v_n^2}{r_n} \quad (8.3.38)$$

se va obține, prin calcule simple, atît expresia cuantificată a energiei electronului din atomul de hidrogen ($Z = 1$)

$$E_n = \frac{m_e v_n^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} = -\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (8.3.39)$$

cît și formula seriilor spectrale

$$\nu = \frac{E_{n_2} - E_{n_1}}{h} = R_\infty \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (8.3.40)$$

în care

$$R_\infty = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^3} = 3,8 \cdot 10^{10} \text{ Hz} \quad (8.3.41)$$

reprezintă constanta lui Rydberg pentru un nucleu fix (deci pentru $m_N \rightarrow \infty$).

Succesele semnalate ale conceptului de undă asociată microparticulelor au determinat o analiză atentă a posibilităților pe care le oferă acest concept pentru elaborarea unei teorii mai cuprinzătoare a fenomenelor microcosmice, în care să fie încorporată dualitatea undă-corpusul.

§ 8.4. FUNCȚIA DE UNDĂ ȘI INTERPRETAREA EI STATISTICĂ

În paragraful precedent s-a arătat că unda asociată unei microparticule care se deplasează rectiliniu și uniform poate fi descrisă prin funcția de undă plană $\psi(x, t)$, dată de expresia

$$\psi(x, t) = \psi_0 e^{-i\omega(t-x/v_f)} \quad (8.4.1)$$

Vom generaliza această expresie pentru cazul în care microparticula se deplasează liber în lungul unei direcții oarecare în spațiu, precizată prin vectorul de undă \mathbf{k} . Atunci, cu (8.3.9) expresia (8.4.1) se va scrie sub următoarea formă

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0 e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}, \quad (8.4.2)$$

Ținând în continuare cont de relația (8.3.12) și de faptul că $E = \hbar \omega$ putem scrie această funcție și sub forma

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0 \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} (Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} \quad (8.4.3)$$

în care, așa cum se vede, se reflectă și aspectul corpuscular al microparticulei (deși încă destul de vag), deoarece în faza acestei unde intră tocmai acțiunea mecanică $\mathcal{S} = \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et$.

Construind astfel o teorie, ce s-a numit „mecanică cuantică”, pe baza funcției de undă se crează analogii fertile cu optica ondulatorie, analogii care, asemenea celor dintre mecanica clasică și optica geometrică, rodesc idei noi.

De fazele undelor sînt legate, așa cum s-a văzut în §7.3 și 7.4, fenomenele de interferență și de difracție. Dacă fazele a două unde coerente coincid într-un punct, atunci în acel punct amplitudinea rezultantă va fi dată de suma amplitudinilor celor două unde, obținîndu-se o franjă de maxim, iar dacă undele sînt în opoziție de fază se va obține o franjă de minim. În optică, intensitatea acestor franje de lumină este descrisă prin intermediul intensității energetice, care potrivit relațiilor (7.2.7) și (7.2.8) este proporțională cu pătratul modulului amplitudinii unde respective.

Desigur că, în cazul difracției de electroni, intensitatea franjelor de difracție va trebui să fie proporțională cu numărul de electroni ce cad în locul respectivei franje. Pe baza analogiei între cele două tipuri de fenomene, Max Born atribuie, în anul 1926, următoarea *semnificație statistică funcției de undă* $\psi(\mathbf{r}, t)$: pătratul modulului acestei funcții, respectiv mărimea

$$w(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \psi^* \psi, \quad (8.4.4)$$

reprezintă *densitatea de probabilitate* de a găsi microparticula în punctul \mathbf{r} , în cazul în care se încearcă, la momentul t , localizarea respectivei microparticule printr-o măsurătoare. Pe baza unei astfel de interpretări rezultă că măsura numărului de electroni care au trecut prin una dintre fantele dispozitivului de difracție Young și care se găsesc în elementul de volum $d\mathcal{V} = dx dy dz$ se va descrie prin probabilitatea de găsire în acest element de volum a unui electron, probabilitate care este dată de expresia

$$dW = w d\mathcal{V} = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathcal{V}. \quad (8.4.5)$$

Atunci mărimea

$$w(\mathbf{r}, t) = \frac{dW}{d\mathcal{V}} = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (8.4.6)$$

va reprezenta o densitate de probabilitate cu semnificații și proprietăți matematice analoge celei definite în mecanica statistică clasică, prin

relația (5.1.1). De exemplu, această densitate de probabilitate va trebui să satisfacă o condiție de normare de forma

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathcal{V} = 1 \quad (8.4.7)$$

care va atesta existența cu certitudine a microparticulei undeva în spațiul nemărginit. Firește, atunci $\psi(\mathbf{r}, t)$ va reprezenta în același timp și densitatea numărului de microparticule din fiecare punct \mathbf{r} al spațiului la momentul t .

Trebuie însă remarcat că, deși efectele ondulatorii ale microparticulelor pot fi evidențiate practic numai cu ajutorul fasciculelor de microparticule, în care intră de obicei un număr mare de microparticule identice, cum sînt fasciculele monoenergetice de electroni accelerați din experimentele de difracție cu electroni pe rețele cristaline naturale, în relațiile (8.4.4) și (8.4.7) $\psi(\mathbf{r}, t)$ reprezintă funcția de undă atașată unei singure microparticule. Cu alte cuvinte, semnificația statistică a funcției de undă se referă la *comportamentul individual* al microparticulelor și ea reprezintă un mod specific de exprimare a proprietăților de „onduscul” ale acesteia*. Dealtfel, validitatea unui astfel de mod de a privi lucrurile a fost verificată experimental direct, de către V. A. Fabrikant, N. G. Sușkin și L. M. Biberman în anul 1949, prin experiențe de difracție cu dispozitivul Young. Ei obțin imagini de difracție și în cazul unor fascicule de electroni cu intensități extrem de slabe (mărind timpul de expunere), cînd există certitudinea că electronii trec în mod individual cînd printr-o fantă, cînd prin cealaltă a dispozitivului (fig. 8.4.1). Dar și aici, ca și în cazul fasciculelor intense de electroni, este de neînțeles de ce, atunci cînd

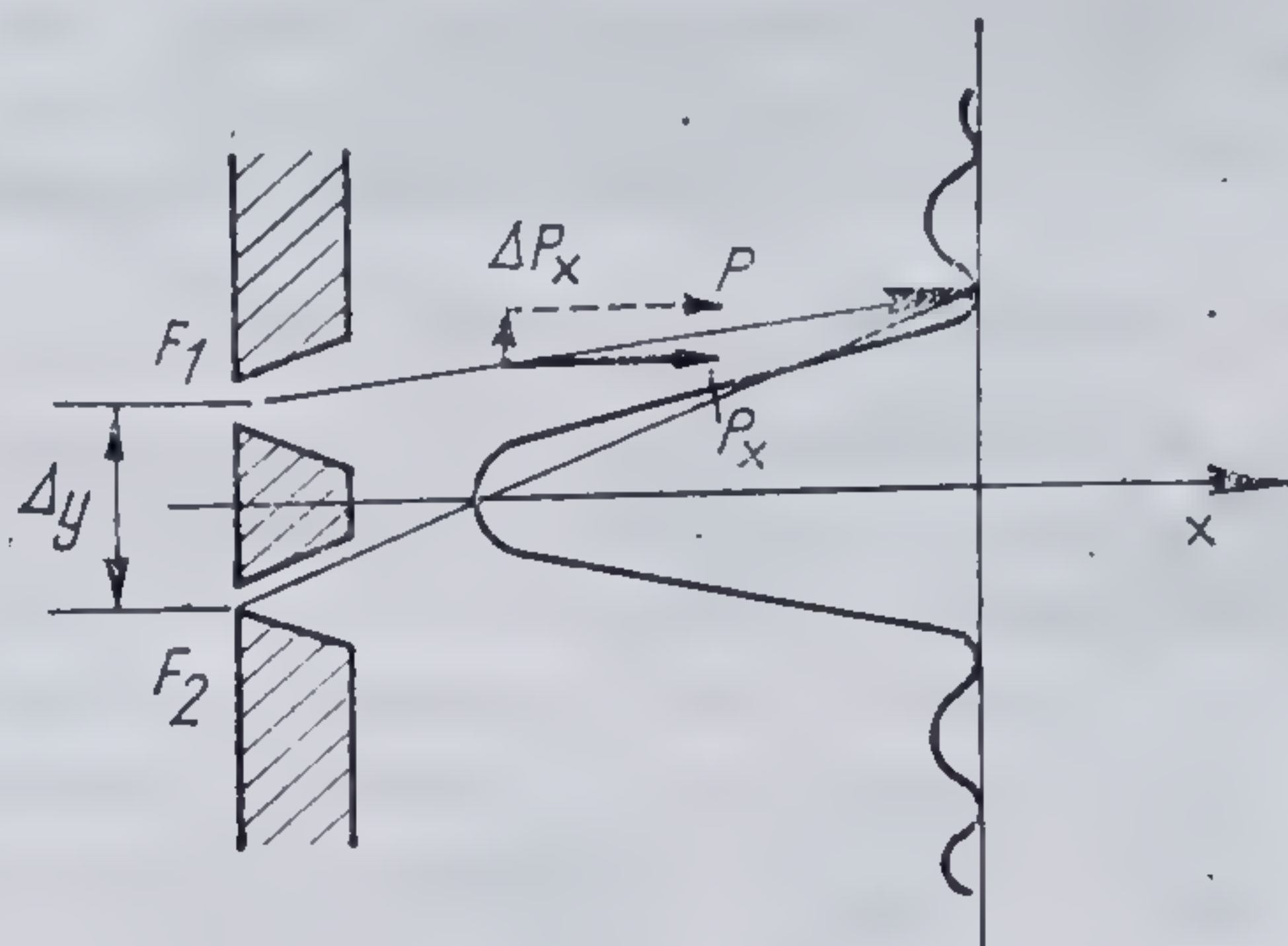


Fig. 8.4.1.

una din fantele F_1 sau F_2 se obturează, franjele de difracție dispar, pentru a reapare de îndată ce se lasă deschise ambele fante. Cine dirijează traiectoriile electronilor care trec în mod individual prin câte o fantă, în așa

* Ulterior, L. de Broglie împreună cu P. Vigier, L. Bohm și alții au încercat să lege acest comportament statistic de existența unui nivel subcuantic, descriabil prin parametru pe care încă nu-l cunoaștem (parametrii ascunși) [12].

fel încît acestea să fie orientate, chiar și numai statistic (fig. 8.4.2) pe direcțiile franjelor de maxim? Răspunsurile date la o astfel de întrebare au fost, și continuă să fie, diverse [12, 33]. Creatorii mecanicii cuantice au plecat de la ideea interpretării statistice a funcției de undă $\psi(r, t)$ și,



Fig. 8.4.2.

prin impunerea condiției ca această funcție să satisfacă unor ecuații liniare, de tipul ecuației undelor (2.5.13), au reușit să construiască pentru noua teorie un edificiu matematic solid și un limbaj specific (acela al operatorilor cuantici), folosind o metodologie adecvată, izvorită direct din datele experimentale [8, 28, 62, 77, 139].

În cadrul acestei noi teorii — al mecanicii cuantice — se atribuie o semnificație cu totul deosebită, esențială, *procesului de măsurare* la nivel microcosmic (numit adesea și nivel cuantic) a unor mărimi caracteristice microparticulelor. Unele dintre aceste mărimi, cum sînt poziția, viteza impulsul, momentul cinetic, energia etc., își păstrează caracterul de variabile ca și în mecanica clasică și de aceea sînt denumite *variabile dinamice cuantice* sau *observabile cuantice*. Altele, cum sînt masa proprie, sarcina, spinul etc., își păstrează tot timpul valoarea constantă și de aceea vor juca în teorie doar rol de parametri. Desigur că specificitatea cuantică a măsurătorii se referă numai la variabilele cuantice.

Pentru a face o măsurătoare la nivel cuantic va trebui să dispunem de un aparat de măsură și de un aparat de înregistrare sau/și de afișare a rezultatelor măsurătorii.

În cazul difracției de electroni aparatul de măsură este constituit din ecranul (macroscopic) cu cele două fante F_1 și F_2 , care permit o localizare a poziției fiecărui electron cu o precizie egală cu lărgimea Δy a aperturii acestor fante. Aparatul de detecție este realizat de ecranul cu emulsia fotografică pe care se înregistrează franjele de difracție*. În acest context, vom denumi *observație* sau *operație de măsurare*, procesul de interacție dintre aparatul de măsură și microparticula supusă măsurării, iar expresia cantitativă a acestei interacții constituie rezultatul măsurătorii, pe care aparatul de detecție îl afișează.

* Ecranul cu emulsia fotografică poate fi înlocuit cu cușca lui Faraday, care permite automatizarea detecției, pentru evitarea oricărui subiectivism.

Este evident, din cele de mai sus, că rezultatul măsurătorii unei mărimi care caracterizează starea obiectului înainte de măsurare este afectat de erorile de măsurare, dar și de „tăria” perturbației pe care o determină interacția lui cu aparatul de măsură.

Perturbația nu poate fi evitată într-o măsurătoare, deoarece măsurătoarea se bazează tocmai pe ea. Această constatare este general valabilă. De exemplu, măsurarea temperaturii unui lichid cu ajutorul termometrului se bazează pe perturbația termică creată de introducerea corpului termometric în respectivul sistem, perturbație care constă dintr-un schimb de căldură între sistem și termometru. Temperatura T , înregistrată de termometru, nu va fi desigur cea pe care o avea sistemul termic înainte de măsurătorii, ci temperatura corespunzătoare noii stări de echilibru termodinamic care se stabilește după introducerea termometrului. Desigur, diferența dintre cele două valori nu este prea mare și ea poate fi stabilită cu exactitate încă înainte de a efectua măsurătoarea.

Situația este cu totul alta în cazul când obiectul supus măsurătorii este o microparticulă. Aici, aparatul de măsură este un corp macroscopic care determină întotdeauna o perturbație însemnată stării microparticulei. De aceea, dintr-o măsurare obținem informații numai asupra stării microparticulei după ce a trecut prin aparatul de măsură. Dacă un fascicul monoenergetic de electroni produce imagini de difracție la trecerea printr-un orificiu de lărgime Δy (fig. 8.4.3), atunci, firește că impulsul lor p după trecerea prin fantă va fi diferit de impulsul p_0 pe care-l aveau înainte

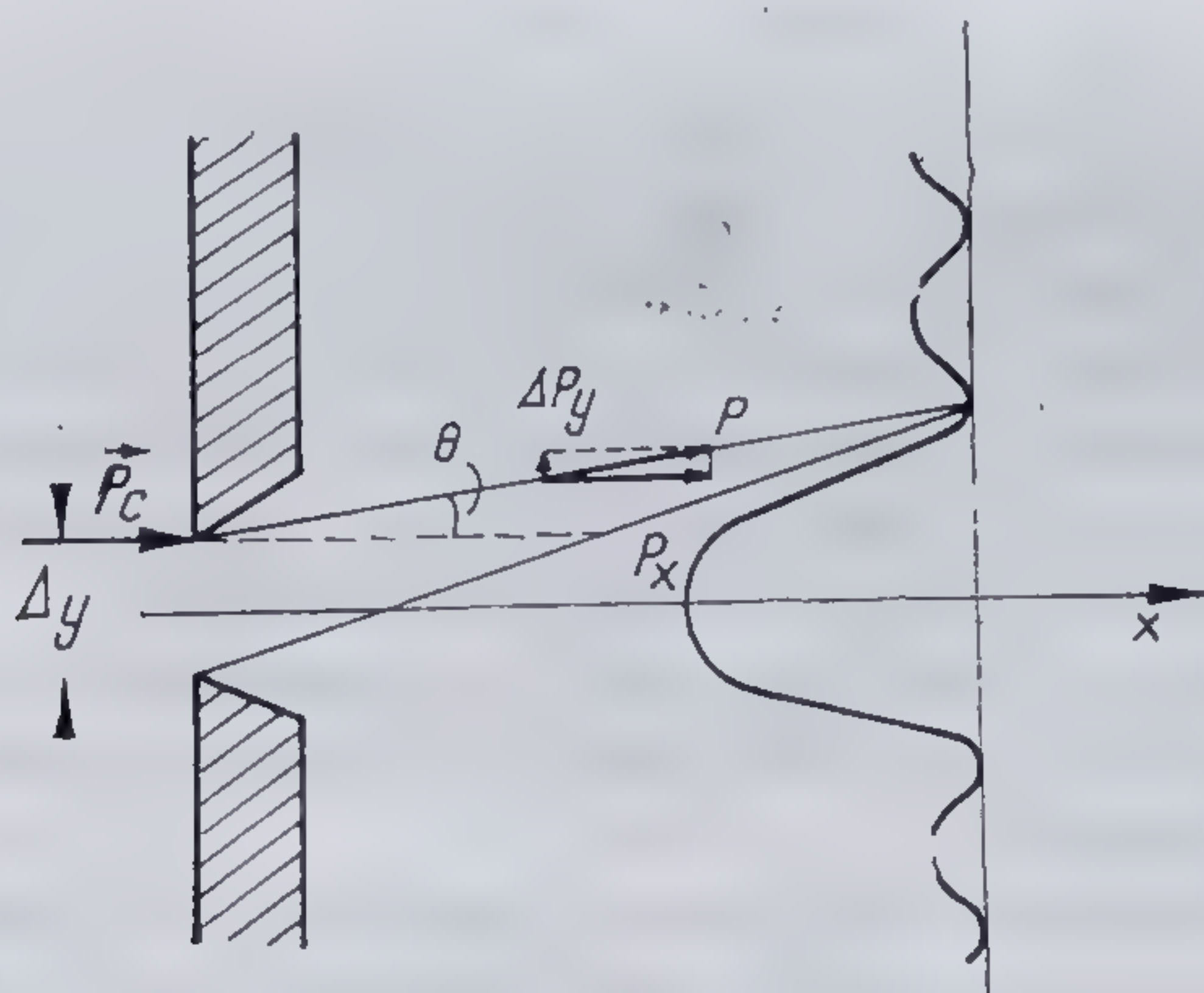


Fig. 8.4.3

de această trecere. Respectiva diferență se datorește componentei transversale Δp_y care apare la trecerea microparticulei prin fantă și pe care o putem atribui tocmai interacției dintre microparticulă și fantă.

Dar dacă se acceptă o descriere ondulatorie, pentru o fantă de lărgime Δy , direcția θ spre primul minim de difracție este determinată, conform lui (7.4.21), de condiția

$$\Delta y \cdot \sin \theta = \lambda \quad (8.4.8)$$

care poate fi scrisă sub forma $\lambda/\Delta y = \sin \theta \simeq \operatorname{tg} \theta = \Delta p_y/p_0$ și din care, cu $\lambda = h/p_0$, rezultă tocmai relația de nedeterminare Heisenberg: $\Delta p_y \cdot \Delta y \geq h$.

Pe baza acestui rezultat se admite adesea că relațiile de nedeterminare se datorează perturbațiilor necontrolabile pe care aparatul de măsură le creează microparticulelor (vezi și §8.7).

În lumina celor de mai sus, importanța actului măsurătorii în mecanica cuantică nu poate fi subliniată îndeajuns. Ea justifică, dealtfel, efortul lui von Neumann de a așeza fundamentele mecanicii cuantice pe o teorie matematică a măsurării, riguroasă și extrem de elaborată. Legată atât de intim de actul măsurării, mecanica cuantică ne apare, prin excelență, ca un sistem articulat și eficient de *reflectare* a realității, în sensul teoriei cunoașterii a materialismului dialectic. Valoarea de adevăr a rezultatelor sale s-a verificat amplu, de-a lungul acestui secol, prin experiență directă și înfăptuiri din cele mai remarcabile ale revoluției tehnico-științifice contemporane.

§ 8.5. LIMBAJUL ȘI POSTULATELE MECANICII CUANTICE

S-a menționat în paragraful precedent că *mechanica cuantică*, ale cărei principii derivă direct din experiență, este o teorie *esențialmente statistică*. Dată fiind semnificația statistică a funcției de undă ψ , în cadrul acestei teorii, de o importanță deosebită se dovedesc a fi valorile medii ale variabilelor dinamice (observabilelor) care descriu starea microparticulelor. Valoarea medie a unei observabile A , pe care o vom nota prin $\langle A \rangle$ se definește într-un mod analog celui folosit în statistica clasică (vezi 5.1.6).

Pentru o microparticulă aflată în stare de mișcare liberă, descrisă cuantic de unda plană (8.4.2), valorile medii ale coordonatei x și ale impulsului p_x vor fi date de expresii de forma

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} w(x, t) x \, dx, \quad \langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} w(x, t) p_x \, dx \quad (8.5.1)$$

respectiv, cu (8.4.6), de expresiile

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) x \psi(x, t) \, dx, \quad \langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) p_x \psi(x, t) \, dx. \quad (8.5.2)$$

De remarcă că în cazul unei funcții de undă plane, de forma (8.4.3), se poate scrie $p_x \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi$, ceea ce înseamnă că relațiile (8.5.2) pot fi rescrise și sub forma

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{x} \psi(x, t) dx; \quad \langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{p}_x \psi(x, t) dx. \quad (8.5.3)$$

Aici s-au folosit următoarele două simboluri

$$\hat{x} = x_0, \quad \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (8.5.4)$$

pentru a exprima concis operațiile matematice ce urmează a se efectua asupra funcției de undă ψ , situată în partea lor dreaptă.

Simbolurile (8.5.4) aparțin unei cuprinzătoare și importante categorii matematice, a *operatorilor*. În cazul de față, operatorii \hat{x} și \hat{p}_x denotă operații matematice concrete efectuate asupra expresiilor algebrice care îi urmează. În general, însă, matematica operatorilor se poate constitui în mod abstract, definind aplicații ale unor mulțimi pe ele înșile sau pe alte mulțimi și asociind acestor aplicații proprietăți determinate. Dezvoltată în cadrul algebrei liniare, al analizei funcționale și mai cu seamă ca domeniu independent, teoria operatorilor continuă să se afirme ca o ramură de vîrf a matematicilor moderne, indispensabilă științelor de bază și tehnice care apelează la limbaje formale.

Un operator se numește *liniar* dacă satisface următoarele două condiții

$$\hat{O}(\psi_1 + \psi_2) = \hat{O}\psi_1 + \hat{O}\psi_2, \quad \hat{O}(c\psi) = c\hat{O}\psi; \quad c = \text{număr}. \quad (8.5.5)$$

El este și *hermitic* dacă are valori medii reale, adică:

$$\langle \hat{O} \rangle \equiv \langle \hat{O} \rangle^*, \text{ respectiv } \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{O} \psi d\mathcal{V} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi (\hat{O} \psi)^* d\mathcal{V} \quad (8.5.6)$$

A fost creată o algebră a operatorilor bazată pe existența operatorului unitate \hat{I} , a operatorului de însumare \hat{S} și a celui de multiplicare \hat{P} , definiți prin expresiile

$$\hat{I}\psi = \psi \quad (8.5.7)$$

$$(\hat{O}_1 \pm \hat{O}_2)\psi = \hat{S}\psi \quad (8.5.8)$$

$$\hat{O}_1(\hat{O}_2\psi) = (\hat{O}_1\hat{O}_2)\psi = \hat{P}\psi. \quad (8.5.9)$$

De notat că în general produsul a doi operatori nu este comutativ

$$\hat{O}_1\hat{O}_2\psi \neq \hat{O}_2\hat{O}_1\psi. \quad (8.5.10)$$

De exemplu, dacă $\hat{O}_1 = x$; $\hat{O}_2 = \frac{d}{dx}$, atunci

$$\hat{O}_1(\hat{O}_2\psi) = x \frac{d\psi}{dx}; \quad \hat{O}_2(\hat{O}_1\psi) = \frac{d}{dx}(x\psi) = x \frac{d\psi}{dx} + \psi \quad (8.5.11)$$

și deci

$$\hat{O}_2\hat{O}_1 - \hat{O}_1\hat{O}_2 = x \frac{d}{dx} - \frac{d}{dx}x = \hat{I}.$$

Dacă doi operatori satisfac condiția

$$[\hat{O}_1, \hat{O}_2]_- = \hat{O}_1\hat{O}_2 - \hat{O}_2\hat{O}_1 = 0 \quad (8.5.12)$$

ei se numesc *comutativi*, operatorul $[\hat{O}_1, \hat{O}_2]_-$ numindu-se adesea *comutator*, iar dacă satisfac condiția

$$[\hat{O}_1, \hat{O}_2]_+ = \hat{O}_1\hat{O}_2 + \hat{O}_2\hat{O}_1 = 0 \quad (8.5.13).$$

ei se numesc *anticomutativi*, operatorul $[\hat{O}_1, \hat{O}_2]_+$, numindu-se *anticomutator*.

O noțiune importantă în teoria operatorilor este noțiunea de *valoare proprie a unui operator*. O astfel de valoare intervine în stările pentru care dispersia operatorului este nulă. *Dispersia unui operator* se definește în mod analog celei din teoria fluctuațiilor termodinamice (§5.5), printr-o expresia de forma

$$\langle (\Delta\hat{O})^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (\Delta\hat{O})^2 \psi d\mathcal{V} = \int_{-\infty}^{\infty} |\Delta\hat{O}\psi|^2 d\mathcal{V}$$

în care $\Delta\hat{O} = \hat{O} - \langle O \rangle$. Pentru dispersie nulă, din expresia de mai sus rezultă

$$\Delta\hat{O}\psi = (\hat{O} - \langle O \rangle)\psi = 0$$

adică

$$\hat{O}\psi = \langle O \rangle\psi. \quad (8.5.14)$$

Prin urmare, în starea proprie, acțiunea operatorului \hat{O} asupra funcției ψ se reduce la înmulțirea respectivei funcții cu valoarea medie a operatorului \hat{O} .

De notat că o relație de forma (8.5.14) reprezintă matematic o ecuație diferențială (sau cu derivate parțiale), care în cazul operatorilor liniari va admite, în conformitate cu principiul de superpoziție, mai multe soluții ψ_n . Acele soluții ψ_n care satisfac și anumite condiții la limită reprezintă *funcțiile de undă proprii* ale operatorului \hat{O} .

Operatorul „coordonată” \hat{x} și operatorul „componentă a impulsului” \hat{p}_x sînt *operatori fundamentali* ai mecanicii cuantice, în sensul că,

cu ajutorul lor, se pot obține expresiile tuturor celorlalți operatori cuantici asociați mărimilor măsurabile, numite „observabile cuantice”.

Există o regulă formală pentru a realiza aceasta și anume, se scriu expresiile care leagă respectivele variabile dinamice de coordonata x și de componenta p_x , iar apoi în aceste expresii se înlocuiesc variabilele x și p_x cu simbolurile date de (8.5.4). Iată câteva exemple :

— operatorul impuls $\hat{\mathbf{p}}$

$$\mathbf{p} = \mathbf{i} p_x + \mathbf{j} p_y + \mathbf{k} p_z, \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \left(\mathbf{i} \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial z} \right) = -i\hbar \nabla; \quad (8.5.15)$$

— operatorul energie cinetică \hat{T} (nerelativistă)

$$T = \frac{m_0 v^2}{2} = \frac{p^2}{2m_0}, \quad \hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta; \quad (8.5.16)$$

— operatorul moment cinetic $\hat{\mathbf{L}}$

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \mathbf{i} (y p_z - z p_y) + \mathbf{j} (z p_x - x p_z) + \mathbf{k} (x p_y - y p_x)$$

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right); \quad \hat{L}_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right); \quad \hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right); \quad (6.5.17)$$

— operatorul hamiltonian \hat{H}

$$H = T + V(\mathbf{r}); \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + V(\mathbf{r}). \quad (8.5.18)$$

Dacă microparticula este încărcată electric cu sarcina q și se găsește într-un câmp electromagnetic descris prin potențialul vector \mathbf{A} și potențialul scalar $\varphi(\mathbf{r})$, atunci plecând de la relația (6.5.25) se obține

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_0} (\hat{\mathbf{p}} - q \hat{\mathbf{A}})^2 + q \varphi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}). \quad (8.5.19')$$

Desigur, operatorii cuantici definiți mai sus sînt specifici numai *meccanicii cuantice nerelativiste* ($v \ll c$), pentru mecanica cuantică relativistă fiind necesară construirea unor operatori specifici, în conformitate cu legile mecanicii relativiste (vezi §8.10).

Operatorii mecanicii cuantice nerelativiste satisfac anumite relații de comutare, care se pot stabili ușor plecând de la definiția (8.5.12) a comutatorului. Ei sînt liniari și hermitici, deci au ca valori proprii numere reale. Spectrul valorilor proprii ale unui operator cuantic poate fi atît un spectru discret, cît și unul continuu. În ambele cazuri funcțiile de undă proprii satisfac așa numitele *condiții de ortonormare*. Pentru stabilirea acestor condiții, vom admite că $\langle H \rangle_n$ și $\langle H \rangle_m$ sînt două dintre valorile proprii distincte ale operatorului hamiltonian \hat{H} . Atunci, în conformitate cu (8.5.14) se poate scrie

$$\hat{H} \psi_m = \langle H \rangle_m \psi_m; \quad \hat{H}^* \psi_n^* = \langle H \rangle_n \psi_n^* \quad (8.5.20)$$

Dacă se înmulțește la stînga prima egalitate cu ψ_n^* , iar a doua cu ψ_m , apoi se scad cele două și expresia obținută se integrează peste tot domeniul de existență al funcțiilor ψ , se va obține

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\psi_n^* \hat{H} \psi_m - \psi_m \hat{H}^* \psi_n^*) d\mathcal{V} = (\langle H \rangle_m - \langle H \rangle_n) \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_m d\mathcal{V} = 0.$$

Întrucît $\langle H \rangle_m \neq \langle H \rangle_n$, rezultă

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_m d\mathcal{V} = 0 \quad (8.5.21)$$

Funcțiile de undă ψ_n și ψ_m , care satisfac o astfel de condiție, se numesc *ortogonale*. De altă parte, din condiția de normare (8.4.7) rezultă

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_n d\mathcal{V} = 1 \quad (8.5.22)$$

asa încît funcțiile de undă proprii ale unui operator cuantic vor satisface următoarea *condiție de ortonormare*

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_m d\mathcal{V} = \delta_{nm} = \begin{cases} 1; & n = m \\ 0; & n \neq m. \end{cases} \quad (8.5.23)$$

Condiții de ortonormare asemănătoare pot fi scrise și pentru cazul operatorilor care posedă spectre de valori proprii continue. Dacă α este o variabilă continuă de care depinde funcția de undă $\psi = \psi(\mathbf{r}, t, \alpha)$, atunci pentru orice pereche de valori α_1 și α_2 va fi satisfăcută următoarea condiție

$$\frac{1}{\Delta\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{\alpha_1}^{\alpha_1 + \Delta\alpha_1} \psi(\mathbf{r}, t, \alpha_1) d\alpha_1 \right] \left[\int_{\alpha_2}^{\alpha_2 + \Delta\alpha_2} \psi(\mathbf{r}, t, \alpha_2) d\alpha_2 \right]^* d\mathcal{V} = \delta_{\alpha_1, \alpha_2}. \quad (8.5.24)$$

Trebuie reținut că prin utilizarea unor operatori cuantici liniari se asigură *liniaritatea ecuațiilor de valori proprii* ale acestora, iar din această liniaritate rezultă că respectivele ecuații vor oferi soluții în conformitate cu *principiul de superpoziție* din fizica undelor (§2.5), care afirmă că dacă ψ_1, \dots, ψ_n sînt soluții ale unei astfel de ecuații, atunci și combinația liniară

$$\psi = \sum_{n=1}^N C_n \psi_n + \sum_{\alpha} C(\alpha) \int_{\alpha}^{\alpha + \Delta\alpha} \psi(\alpha) d\alpha \quad (8.5.25)$$

va fi o soluție a aceleiași ecuații. Obținută pe o astfel de cale, funcția de undă ψ va poseda proprietăți analoge funcțiilor de undă din fizica clasică și, de aceea, va exprima corect comportarea ondulatorie a microparticulelor.

Totodată, asocierea de operatori hermitici observabilelor cuantice asigură obținerea de valori proprii reale, corespunzând rezultatelor măsurătorilor efectuate asupra observabilelor în stările proprii ale sistemului cuantic — ce nu pot fi, evident, decât reale.

Cele de mai sus au condus la fundamentarea mecanicii cuantice pe următoarele postulate :

1°. Stările cuantice ale unei microparticule sau ale unui sistem de microparticule sînt descrise în mod univoc și complet de către funcția de undă $\psi(\mathbf{r}, t)$, atașată acestor stări.

2°. Fiecărei mărimi observabile a sistemului cuantic i se asociază un operator cuantic \hat{O}_i , liniar și hermitic.

3°. Valorile măsurabile ale observabilelor, adică valorile așteptate să apară în experimente directe, sînt tocmai valorile proprii ale operatorilor cuantici atașați respectivelor observabile. Aceste valori pot fi obținute și prin calcule, fiind date de valorile medii ale operatorilor cuantici în starea descrisă de ψ . Probabilitatea de a se obține o anumită valoare proprie atunci cînd starea microparticulei este descrisă prin intermediul funcțiilor de undă proprii, va fi dată, în conformitate cu (8.5.25), de valorile $|C_n|^2$ și respectiv $|C(\alpha)|^2 \Delta\alpha$.

4°. Dată fiind semnificația fizică atribuită funcțiilor de undă ψ în mecanica cuantică, acestea vor trebui ca, în calitate de soluții ale ecuațiilor cu valori proprii ale operatorilor cuantici, să satisfacă următoarele *condiții standard* :

- să fie continué,
- să fie finite,
- să fie univoc definite, (8.5.26)
- să fie de pătrat integrabil.

E. Schrödinger a fost primul care a remarcat că îndeplinirea de către funcțiile de undă ψ a unor astfel de condiții standard determină, în anumite cazuri, spectre discrete pentru valorile proprii ale operatorilor cuantici și acestea sînt tocmai spectrele cuantice ale observabilelor respective. De aceea, Schrödinger și-a intitulat remarcabila sa lucrare de mecanică cuantică „Cuantificarea ca problemă de valori proprii”.

De notat că la rezultate analoage ajunge și W. Heisenberg, dar folosind un alt limbaj matematic și anume acela al calculului matriceal (vezi anexa 2). El pleacă de la faptul că energia sistemelor cuantificate parcurge întotdeauna un șir discret de valori E_n ($n = 1, 2, \dots$), așa cum au arătat experiențele lui Frank și Hertz (§10.2). Acestor valori le corespund funcții de undă proprii $\psi_n(\mathbf{r})$, în așa fel încît combinația lor liniară

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n C_n \psi_n(\mathbf{r}) \quad (8.5.27)$$

va descrie complet starea energetică a respectivului sistem. Se observă că, în acest context, totalitatea valorilor C_n va exprima funcția de undă ψ într-o *reprezentare energetică* (E), întrucât $|C_n|^2$ reprezintă probabilitatea de realizare a stărilor în care energia sistemului are valorile E_n . Într-o astfel de reprezentare se schimbă, desigur, și modul de exprimare a operatorilor cuantici. Întrucât este vorba de operatori liniari și hermitici, vom avea în vedere că acțiunea lor asupra lui $\psi(\mathbf{r})$ va conduce la o altă funcție $f(\mathbf{r})$, în conformitate cu relația

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}). \quad (8.5.28)$$

Dar în reprezentarea (E) și această nouă funcție $f(\mathbf{r})$ va trebui să aibă tot forma (8.5.27), adică

$$f(\mathbf{r}) = \sum_n b_n \psi_n(\mathbf{r}) \quad (8.5.29)$$

asa încît, ecuația (8.5.28) primește forma

$$\sum_n b_n \psi_n(\mathbf{r}) = \sum_n C_n \hat{H} \psi_n(\mathbf{r}). \quad (8.5.30)$$

Înmulțind aici la stînga cu $\psi_m^*(\mathbf{r})$, apoi integrînd pe domeniul de existență al funcțiilor ψ și luînd în considerare condițiile de ortonormare (8.5.23) se obține următorul sistem de ecuații liniare

$$b_m = \sum_n H_{mn} C_n \quad (8.5.31)$$

în care s-a folosit notația :

$$H_{mn} = \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \hat{H} \psi_n(\mathbf{r}) d\mathcal{V}. \quad (8.5.32)$$

Adesea, în locul acestei notații se folosesc *notațiile lui Dirac*

$$H_{mn} = \langle m | H | n \rangle \quad (8.5.33)$$

în care $|n\rangle$ și $\langle m|$ sînt așa numiții *vectori de stare ket și bra*, prin care se precizează atît starea inițială, cît și starea finală (după acțiunea operatorului \hat{H}) a sistemului.

Mulțimea mărimilor (H_{mn}) formează *matricea reprezentării* operatorului \hat{H} în reprezentarea (E). Se observă că sistemul de ecuații (8.5.31) poate fi scris și sub forma

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \dots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} & \dots & H_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{m1} & H_{m2} & \dots & H_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_n \end{pmatrix} \quad (8.5.34)$$

respectiv

$$|b_m\rangle = \mathbf{H}_{mn} |C_n\rangle \quad (8.5.35)$$

în care vectorii ket $|b_m\rangle$ și $|c_n\rangle$ sînt vectori coloană, iar \mathbf{H}_{mn} este o matrice de forma

$$\mathbf{H}_{mn} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \dots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} & \dots & H_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ H_{m1} & H_{m2} & \dots & H_{mn} \end{pmatrix} \quad (8.5.36)$$

Această matrice exprimă operatorul \hat{H} în reprezentarea (E). Desigur că atunci matricele

$$\mathbf{H}_{mn}^* = \begin{pmatrix} H_{11}^* & H_{12}^* & \dots & H_{1n}^* \\ H_{21}^* & H_{22}^* & \dots & H_{2n}^* \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ H_{m1}^* & H_{m2}^* & \dots & H_{mn}^* \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{H}}_{nm}^* = \begin{pmatrix} H_{11}^* & H_{21}^* & \dots & H_{m1}^* \\ H_{12}^* & H_{22}^* & \dots & H_{m2}^* \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ H_{1n}^* & H_{2n}^* & \dots & H_{mn}^* \end{pmatrix} \quad (8.5.37)$$

vor fi *complex conjugata*, respectiv *conjugata transpusei* matricei \mathbf{H}_{mn} (vezi anexa 2).

Dacă o matrice \mathbf{H}_{nm} este egală cu conjugata transpusei ei, adică dacă

$$\bar{\mathbf{H}}_{mn}^* = \mathbf{H}_{nm}^* = \mathbf{H}_{mn}^+ \quad (8.5.38)$$

atunci această matrice se numește *hermitică* sau *autoadjunctă*. De notat că elementele de pe diagonală unei matrice autoadjuncte sînt numere reale. Se poate demonstra ușor că un operator hermitic, exprimat printr-o matrice în reprezentarea proprie, are elemente nenule numai pe diagonală respectivei matrice. Așa, de exemplu, în reprezentarea (E), operatorul hamiltonian \hat{H} poate fi exprimat prin matricea

$$\mathbf{H}_{nn} = \begin{pmatrix} H_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & H_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & H_{nn} \end{pmatrix} \quad (8.5.39)$$

Elementele de pe diagonală acestei matrice sînt tocmai valorile proprii ale lui \hat{H} .

Ulterior, Schrödinger a demonstrat că limbajul matriceal al mecanicii cuantice este echivalent cu cel obișnuit, al funcțiilor de undă $\psi(\mathbf{r}, t)$, conducînd în final la aceleași rezultate. Folosirea concomitentă a mai multor reprezentări este determinată de altfel de faptul că înseși posibilitățile practice de care dispunem selectează microparticulele fie după coordonate, fie după impuls (fie după alte perechi de mărimi complementare \hat{L}^2 și \hat{L}_z , \hat{L}_x și \hat{L}_y etc.), în conformitate cu relațiile de nedeterminare. Așa, de exemplu, într-o reprezentare (p), în care componentele impulsului sînt date prin matrice diagonale, se va putea defini o funcție de undă de tipul:

$$\Phi(\mathbf{p}, t) = \sum_n a_n \varphi_n(\mathbf{p}, t) \quad (8.5.40)$$

care să descrie starea cuantică a sistemului. Avînd în vedere că și de această dată pătratul modulului $|\Phi(\mathbf{p}, t)|^2$ reprezintă aceeași densitate de probabilitate ca și $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$, înseamnă că se va putea scrie

$$\int |\Phi(\mathbf{p}, t)|^2 d\mathbf{p} \equiv \int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} \quad (8.5.41)$$

din care rezultă că $\Phi(\mathbf{p}, t)$ este transformata Fourier a funcției $\psi(\mathbf{r}, t)$ (și invers), adică

$$\Phi(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi(\mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})/\hbar} d\mathbf{r}, \quad \psi(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{3/2} \int \Phi(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})/\hbar} d\mathbf{p}. \quad (8.5.42)$$

De notat că *teoria reprezentărilor* și *teoria mecanicii cuantice* în general a-u dezvoltat în formalismul spațiului Hilbert, al funcțiilor de undă proprii, respectiv al vectorilor de stare ket și bra. Acesta este un spațiu liniar, infinit dimensional, în care se conservă toate proprietățile funcțiilor de undă enumerate prin (8.5.26) [8, 62, 77].

În continuare se va folosi cu predilecție reprezentarea Schrödinger, a funcțiilor de undă, care prezintă avantajul obținerii unor ecuații de evoluție pentru ψ — ecuațiile lui Schrödinger — și care se pretează unor calcule mai apropiate de percepția și abilitățile curente, precum și unor interpretări mai intuitive.

§ 8.6. ECUAȚIA LUI SCHRÖDINGER

Stabilirea expresiei funcției de undă $\psi(\mathbf{r}, t)$ în reprezentarea Schrödinger constă în rezolvarea unor ecuații de valori proprii de forma (8.5.14), pentru operatorii cuantici atașați observabilelor respectivului sistem. Așa, de exemplu, în cazul unei microparticule nerelativiste aflată într-o stare staționară de energie E , din ecuația

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = \langle H \rangle \psi(\mathbf{r}) \quad (8.6.1)$$

în care \hat{H} este dat de (8.5.18), iar $\langle H \rangle = E$, se obține ecuația

$$\Delta\psi(\mathbf{r}) + \frac{2m_0}{\hbar^2} [E - V(\mathbf{r})] \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (8.6.2)$$

cunoscută sub numele de *ecuație Schrödinger independentă de timp*. Denumirea subliniază faptul că această ecuație se referă la stări cuantice staționare. De aceea, în argumentul funcției de undă s-a omis variabila „ t ”, luîndu-se numai factorul $\psi(\mathbf{r})$ din expresia undei plane

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad (8.6.3)$$

Desigur că ecuația (8.6.2) poate fi extinsă și la descrierea stărilor cuantice staționare ale unui sistem cuantic format din mai multe micro-

particule. Dar dacă respectivul sistem interacționează cu mediul exterior, atunci starea lui cuantică va evolua în timp și deci dependența lui ψ de timpul t va fi esențială. Vom descrie o astfel de evoluție în timp printr-o funcție de undă $\psi(\mathbf{r}, t)$, dată de dezvoltarea în serie

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, 0) + \left[\frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right]_0 \Delta t + \dots \quad (8.6.4)$$

în care vom pune

$$\left[\frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right]_0 = \hat{T} \psi(\mathbf{r}, 0) \quad (8.6.5)$$

operatorul \hat{T} exprimând aici operația de derivare în raport cu timpul t . Întrucât momentul $t = 0$ a fost ales în mod arbitrar, operația exprimată prin \hat{T} nu va depinde de t , așa încât expresia (8.6.5) va avea, în general, forma

$$\frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{T} \psi(\mathbf{r}, t). \quad (8.6.6)$$

Ținând cont și de faptul că $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ reprezintă densitatea de probabilitate de a găsi microsistemul în starea descrisă de $\psi(\mathbf{r}, t)$ și admitând că există o determinare cauzală a acestor stări, rezultă că operatorul \hat{T} trebuie să fie un operator liniar și hermitic. Alegerea lui poate fi sugerată de funcția de undă plană (8.4.3), în care caz se vede că avem

$$\frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \psi(\mathbf{r}, t). \quad (8.6.7)$$

Din comparația ultimelor două expresii (8.6.6) și (8.6.7) rezultă că putem atribui și lui E semnificația de operator (se poate pune $\hat{T} = -\frac{i}{\hbar} \hat{E}$),

întrucât din (8.6.7) rezultă $\hat{E} \psi(\mathbf{r}, t) = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi(\mathbf{r}, t)$, în care s-a folosit notația

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (8.6.8)$$

Atunci, înmulțind expresia (8.6.1) cu $e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$, se obține

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t) \quad (8.6.9)$$

Aceasta este *ecuația temporală a lui Schrödinger*. Ea descrie evoluția în timp a sistemelor cuantice și de aceea îndeplinește, în mecanica cuantică, un rol similar cu cel al ecuației lui Newton din mecanica clasică, respectiv cu cel al ecuațiilor lui Maxwell în electrodinamică.

Trebuie totuși remarcat că într-un astfel de limbaj *principiul determinismului* își modifică forma sa laplaceiană într-o formă statistică

și anume: „dacă se cunoaște starea cuantică a sistemului la un moment dat, stare descrisă prin $\psi(\mathbf{r}, 0)$, precum și interacțiile sale interioare și exterioare, interacții descrise prin operatorul hamiltonian \hat{H} , atunci, în conformitate cu ecuația de evoluție a lui Schrödinger (8.6.9), este determinată în mod „previzibil” starea sistemului la orice moment ulterior t .

Se observă că formularea de mai sus, dată principiului determinismului, este similară formulării clasice a lui Laplace, doar că în acest caz starea sistemului nu mai este descrisă prin poziția și impulsul microparticulelor, ci prin funcția de undă $\psi(\mathbf{r}, t)$ atașată lor, a cărei semnificație este, cum s-a văzut, *statistică*.

Ecuația temporală a lui Schrödinger permite aflarea vitezei de variație în timp a oricărei variabile dinamice cuantice, inclusiv a densității de probabilitate: $w(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$. Într-adevăr, se poate scrie

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \cdot \psi \quad (8.6.10)$$

expresie care, cu ecuații de tipul (8.6.9), respectiv cu

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta \psi + V(\mathbf{r}) \psi, \quad -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta \psi^* + V(\mathbf{r}) \psi^* \quad (8.6.11)$$

se transformă ușor la forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) = \frac{i\hbar}{2m_0} \nabla (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*). \quad (8.6.12)$$

Se observă că dacă mărimii vectoriale

$$\mathbf{J} = \frac{i\hbar}{2m_0} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (8.6.13)$$

i se atribuie semnificația de *vector densitate de curent de probabilitate*, atunci relația (8.6.12) devine

$$\frac{\partial |\psi(\mathbf{r}, t)|^2}{\partial t} + \nabla \mathbf{J} = 0 \quad (8.6.14)$$

și exprimă, în formă locală, *legea conservării densității de probabilitate*, respectiv a numărului de microparticule din sistem.

În cazul unei variabile dinamice A , dependentă de timp, a cărei valoare medie este dată de expresia:

$$\langle A(t) \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{A}(t) \psi(\mathbf{r}, t) d\mathcal{V} \quad (8.6.15)$$

se va obține, pentru variația în raport cu timpul

$$\frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} = \int \left[\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{A} \psi + \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi + \psi^* \hat{A} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right] d\mathcal{V}$$

respectiv cu (8.6.9)

$$\frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* [\hat{A} \hat{H} - \hat{H} \hat{A}] \psi d\mathcal{V}. \quad (8.6.16)$$

O expresie de forma :

$$[\hat{A}, \hat{H}]_- = \frac{1}{i\hbar} (\hat{A} \hat{H} - \hat{H} \hat{A}) \quad (8.6.17)$$

se numește *paranteză Poisson cuantică* și posedă proprietăți matematice similare celor atribuite parantezelor Poisson clasice (1.5.23 — 1.5.25). Se vede atunci, că

$$\frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle + \langle [\hat{A}, \hat{H}]_- \rangle \quad (8.6.18)$$

respectiv, dacă \hat{A} nu depinde explicit de timp

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \langle [\hat{A}, \hat{H}]_- \rangle. \quad (8.6.19)$$

Acest rezultat arată că viteza de variație în timp a valorii medii a unei observabile, descrise printr-un operator cuantic independent de timp, este egală cu valoarea medie a parantezei Poisson cuantice atașată respectivului operator. Se vede că dacă pentru un operator \hat{C} este îndeplinită condiția $[\hat{C}, \hat{H}]_- = 0$ atunci valoarea $\langle C \rangle$ rămîne constantă în timp, $\langle C \rangle$ reprezentînd o constantă a mișcării. Desigur că va fi independentă de timp și funcția de undă ψ atașată operatorului \hat{C} .

Rezultă din cele de mai sus că toate sistemele cuantice pentru care operatorul \hat{H} nu conține explicit pe t sînt sisteme staționare, pentru care $E = \text{const.}$, întrucît $\frac{d\langle H \rangle}{dt} = \langle [\hat{H}, \hat{H}]_- \rangle = 0$.

Aplicînd rezultatul (8.6.19) la calcularea vitezei, respectiv a accelerației unei microparticule care se deplasează într-un câmp de forțe conservative, pentru care operatorul \hat{H} este dat de expresia (8.5.18), prin calcule simple [20] se obține

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \langle [\hat{x}, \hat{H}]_- \rangle = \frac{\langle p_x \rangle}{m_0}, \quad \frac{d\langle v \rangle}{dt} = \langle [\hat{v}, \hat{H}]_- \rangle = - \left\langle \frac{\partial V(x)}{\partial x} \right\rangle. \quad (8.6.20)$$

Aceste rezultate, cunoscute sub denumirea de *teoreme ale lui Ehrenfest*, stabilesc că ecuațiile de mișcare ale mecanicii cuantice, scrise pentru valori medii ale observabilelor, au expresii analoge ecuațiilor de mișcare ale mecanicii clasice

§ 8.7. RELAȚII DE CORELAȚIE ÎN MECANICA CUANTICĂ

Din semnificația statistică a funcțiilor de undă rezultă că variabilele dinamice definite în sens cuantic sînt mărimi statistice, cărora li se pot asocia *relații de corelație* de forma (5.5.25). Pentru două astfel de variabile A și B se va putea scrie deci inegalitatea

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \langle \Delta A \cdot \Delta B \rangle^2 \quad (8.7.1)$$

întrucît întotdeauna este îndeplinită condiția

$$\langle (\lambda \Delta A - \Delta B)^2 \rangle \geq 0, \quad (8.7.2)$$

Să admitem, în continuare, că prin A și B s-au notat doi operatori cuantici necomutativi, cum sînt operatorii \hat{x} și \hat{p}_x , definiți de relațiile (8.5.4). Atunci, în locul inegalității (8.7.2), se va defini o integrală pozitivă de forma

$$I(\alpha) = \int |(\alpha \hat{\Delta x} - i \hat{\Delta p}_x) \psi|^2 d\mathcal{V} \geq 0 \quad (8.7.3)$$

în care s-au folosit notațiile

$$\Delta \hat{x} = \hat{x} - \langle x \rangle, \quad \Delta \hat{p}_x = \hat{p}_x - \langle p_x \rangle. \quad (8.7.4)$$

Avînd în vedere relația de necomutativitate

$$[\Delta \hat{x}, \Delta \hat{p}_x]_- = [\hat{x}, \hat{p}_x]_- = i\hbar \quad (8.7.5)$$

integrala $I(\alpha)$ se va putea reduce la următoarea formă

$$I(\alpha) = A\alpha^2 - B\alpha - C \quad (8.7.6)$$

în care s-au folosit notațiile

$$A = \int \psi^* (\Delta \hat{x})^2 \psi d\mathcal{V} = \langle (\Delta x)^2 \rangle, \quad B = \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \Delta \hat{x} \psi + \Delta \hat{x} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) d\mathcal{V} = 1; \quad (8.7.7)$$

$$C = \int \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} d\mathcal{V} = \frac{1}{\hbar^2} \langle (\Delta p_x)^2 \rangle.$$

Din condiția $I(\alpha) \geq 0$, care impune ca discriminantul trinomului (8.7.6) să fie nenegativ, adică $-B^2/4A + C \geq 0$ și $A > 0$, rezultă, cu (8.7.7), inegalitatea

$$\langle (\Delta p_x)^2 \rangle \geq \langle (\Delta x)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (8.7.8)$$

Această inegalitate exprimă o *relație de corelație* a mecanicii cuantice, respectiv *relația de nedeterminare* pentru perechea de variabile comple-

mentare (sau conjugate canonic) x și p_x , așa cum a obținut-o pentru prima dată Heisenberg.

Se poate demonstra ușor că pentru orice pereche de variabile cuantice, cărora li se atașează operatori necomutativi, este îndeplinită inegalitatea

$$\langle (\hat{\Delta A})^2 \rangle \cdot \langle (\hat{\Delta B})^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle [\hat{A}, \hat{B}]_- \rangle. \quad (8.7.9)$$

așa încît relații de corelație de forma (8.7.8) pot fi scrise pentru toate perechile de astfel de variabile complementare*.

Trebuie notat că uneori relațiilor de corelație (sau de nedeterminare) li s-a dat o interpretare filozofică pozitivistă. Potrivit relațiilor de nedeterminare trebuie să acceptăm că, deși microparticulele posedă poziții și impulsuri, nu putem cunoaște (măsura) concomitent exact valorile acestor mărimi. Reprezentantii „școlii de la Copenhaga”, între care fondatori ai mecanicii cuantice ca N. Bohr și W. Heisenberg, au proiectat această constatare — ce exprimă o limită principială a posibilității de interacțiune fizică a subiectului cunoscător, care efectuează măsurătorile, cu realitatea obiectivă a microparticulelor în mișcare — în generalizări filozofice care mută centrul de greutate al problemei de pe *interacțiunea* subiect-obiect pe *realitatea* obiectului; o realitate pe care o chestionează nuanțat din unghiul preceptului pozitivist conform căruia pentru știință există numai ceea ce se poate măsura.

Bohr, de exemplu, spune că în timp ce obiectul fizicii clasice îl constituie evenimentele cu existență obiectivă în spațiu și timp, teoria cuantică studiază numai procese care apar în momentul observației lor și pentru care afirmațiile intuitive cu privire la intervalul dintre aceste observații sînt lipsite de sens. Un alt reprezentant al acestei școli, P. Jordan, a ținut să sublinieze că pozitivismul nu recunoaște „decît faptele nemijlocite de trăire” ca obiect propriu al cercetării științifice.

Asemenea reflecții, ce pun o legitate a raporturilor subiect-obiect într-o perspectivă paradoxală doar din punctul de vedere al *percepției* curente, propunîndu-se, prin urmare, o viziune subiectivistă a lumii, s-au dovedit, prin trecerea timpului, sterile; ele nu a adus nici o nouă lumină asupra microcosmosului și nu au inspirat, prin ele însele, nici o direcție sau străpungere semnificativă în cîmpul cunoașterii. Interpretarea școlii de la Copenhaga ni se înfățișează astăzi ca o expresie intelectuală a unei reacții inițiale, mai degrabă emoționale, de contrariere a bunului simț convențional de către noutatea raporturilor cu obiectele cuantice.

Analiza relațiilor de corelație și al altor principii și legi fundamentale ale mecanicii cuantice trebuie să plece de la natura specific cuantică a comportării microparticulelor, de la comportarea lor duală, ondulator-corpusculară descrisă de funcția de undă ψ . În acest fel, se ajunge (așa cum s-a văzut în §8.6) la reformularea unor principii fundamentale,

* Relațiile $\langle (\hat{\Delta l}_z)^2 \rangle \langle (\hat{\Delta \varphi})^2 \rangle \geq \hbar^2/4$ și $\langle (\hat{\Delta n})^2 \rangle \langle (\hat{\Delta \varphi})^2 \rangle \geq \hbar^2/4$, care se referă la componenta z a momentului cinetic, respectiv la numărul de particule și la unghiul azimutal φ , au suscitat multiple discuții [12].

cum este principiul determinismului și al cauzalității, dar exprimate într-un limbaj statistic, nu mecanicist. Se poate spune că relațiile de corelație derivă din însuși modul statistic de descriere a fenomenelor cuantice, aceste relații avînd menirea să delimiteze domeniul de aplicare a unui „model vizual” [54] cu privire la dualitatea undă-corpuseul.

§ 8.8. TEORIA CUANTICĂ A MIȘCĂRII MICROPARTICULELOR ÎN CÎMPURI DE FORȚE CONSERVATIVE

Prezentăm în cadrul acestui paragraf cîteva probleme simple de teorie cuantică, referitoare la mișcarea microparticulelor în cîmpuri de forțe conservative (forțe care derivă dintr-o funcție potențială $V(\mathbf{r})$), cu scopul de a desprinde atît metode de rezolvare a ecuației lui Schrödinger, cît și semnificațiile fizice ale rezultatelor la care se ajunge în urma acestor rezolvări. Pentru astfel de cazuri, operatorul hamiltonian \hat{H} este dat de expresia (8.5.18) și întrucît el nu conține explicit variabila independentă t , vom avea de a face cu stări staționare, descrise de funcții de undă $\psi(\mathbf{r})$, generate de ecuația Schrödinger, atemporală (8.6.2.)

8.8.1. MIȘCAREA CUANTICĂ UNIDIMENSIONALĂ A UNEI MICROPARTICULE LIBERE

Fie Ox direcția de deplasare a unei microparticule de masă m_0 și energie E . Întrucît $V(x) = 0$, ecuația Schrödinger (8.6.2) se va reduce la forma

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m_0E}{\hbar^2} \psi(x) = 0 \quad (8.8.1)$$

sau cu notația

$$k_x^2 = \frac{2m_0E}{\hbar^2} \quad (8.8.2)$$

la forma

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k_x^2 \psi = 0.$$

O astfel de ecuație este de forma ecuației diferențiale a oscilatorului liniar armonic (vezi (1.7.10) și are soluții de tipul

$$\psi(x) = Ae^{ik_x \cdot x} + Be^{-ik_x \cdot x}. \quad (8.8.3)$$

De remarcat că dacă expresiei de mai sus i se adaugă și factorul $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$, atunci se va obține o funcție de undă $\psi(x, t)$, care va exprima un proces ondulatoriu descris atât printr-o undă ce se propagă în sensul axei Ox (dată de un termen de forma $A \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - \hbar k_x x)\right]$) cât și prin una ce se propagă în sens contrar (dată de termenul $B \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et + \hbar k_x x)\right]$). Dar se poate lua $B = 0$, fără a pierde din generalitatea tratării (unda regresivă nu are o motivație fizică în acest caz), așa încît

$$\psi(x) = A e^{ik_x x}. \quad (8.8.4)$$

O astfel de funcție de undă satisface condițiile standard (8.5.26) pentru orice valoare reală dată lui k_x , ceea ce înseamnă că particula liberă posedă un spectru energetic *continuu*, dat de expresia

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_0}. \quad (8.8.5)$$

Modelul cuantic al particulei libere poate fi aplicat, însă, și la studiul electronilor de conducție din metale. Într-adevăr, observînd că funcția de undă (8.8.4) este o funcție periodică și alegînd perioada de variație L , de valoare macroscopică, așa cum au procedat pentru prima dată Born și Kármán, din condiția $\psi(x + L) \equiv \psi(x)$ rezultă:

$$e^{ik_x L} = 1 \quad (8.8.6)$$

egalitate satisfăcută numai de valorile

$$k_x L = 2\pi n_x; \quad n_x = 0, 1, 2, \dots \quad (8.8.7)$$

Rezultă atunci că energia electronului este cuantificată, fiind dată de expresia

$$E_{n_x} = \frac{\hbar^2 k_{n_x}^2}{2 m_e} = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m_e L^2} n_x^2, \quad n_x = 0, 1, 2, \dots \quad (8.8.8)$$

Saltul energetic de pe nivelul E_n , pe nivelul E_{n+1} se va produce, desigur, prin absorbția unei cuante de energie

$$\varepsilon = E_{n+1} - E_n = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m_e L^2} (2n + 1). \quad (8.8.9)$$

Dar pentru un electron, aflat într-o rețea unidimensională, de constantă $a = 5 \text{ \AA}$ și de lungime $L = 1 \text{ cm}$, admițînd că $n_x = n_{\max} = \frac{L}{a}$, valoarea cuantei ε este de numai 10^{-6} eV . De aceea, reprezentînd nivelele energetice ale electronului din metal într-o schemă Grotrien (fig. 8.8.1),

prin linii orizontale paralele între ele, vom constata că aceste nivele se aşează foarte aproape unul de celălalt, formînd o *bandă energetică permisă*, în sensul că electronul va putea trece practic liber de pe un nivel pe altul, fiindu-i necesară în acest scop o energie mai mică decît 10^{-6}eV .

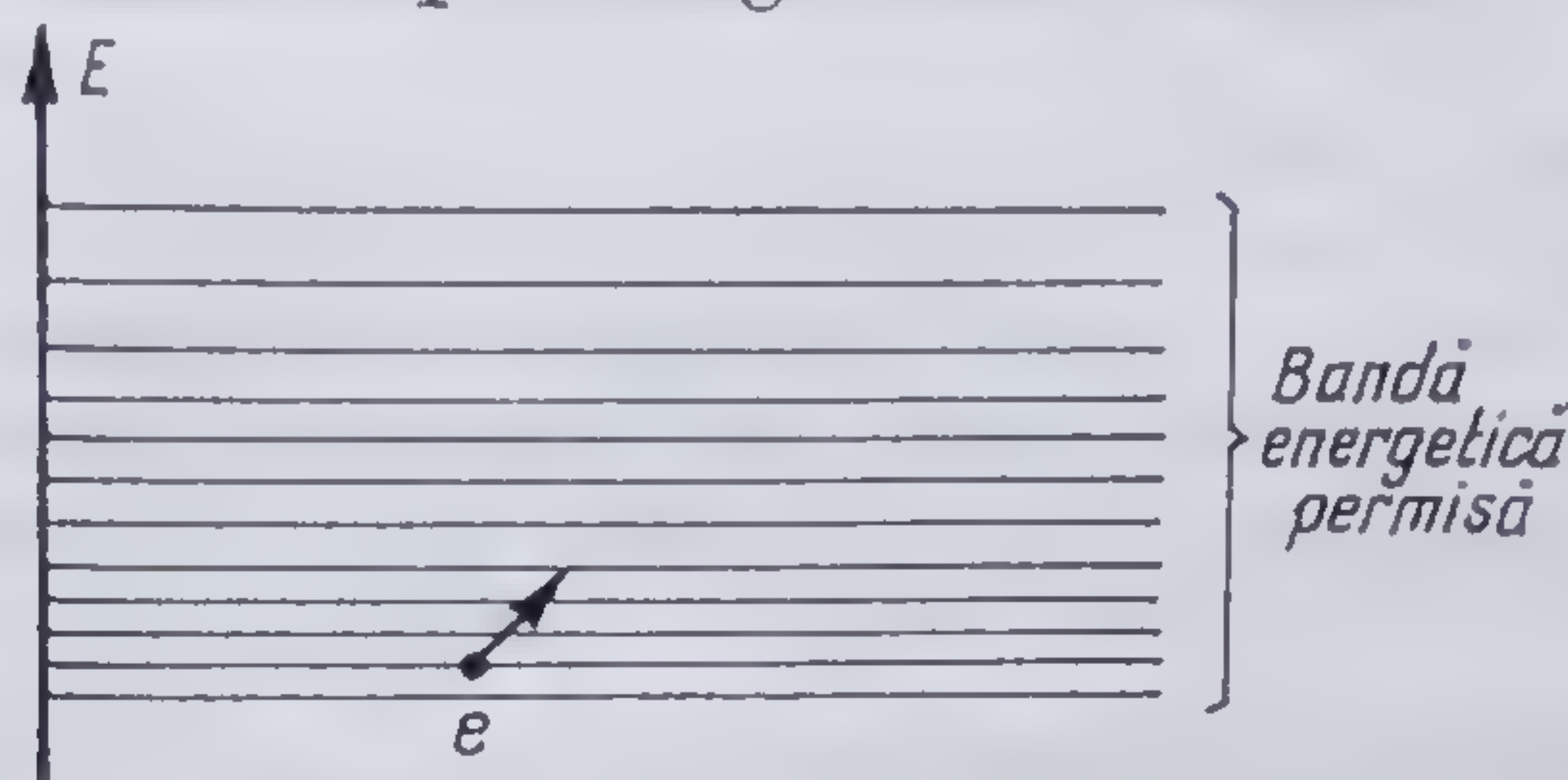


Fig. 8.8.1.

8.8.2. MICROPARTICULA ÎN GROAPA UNIDIMENSIONALĂ DE POTENȚIAL

Există stări fizice reale, așa cum este cazul electronilor captați în vacanțele cationice ale structurilor cristaline ionice (§11.2.6), care pot fi studiate pe modelul „gropii de potențial” cu pereți rectangulari (fig. 8.8.2),

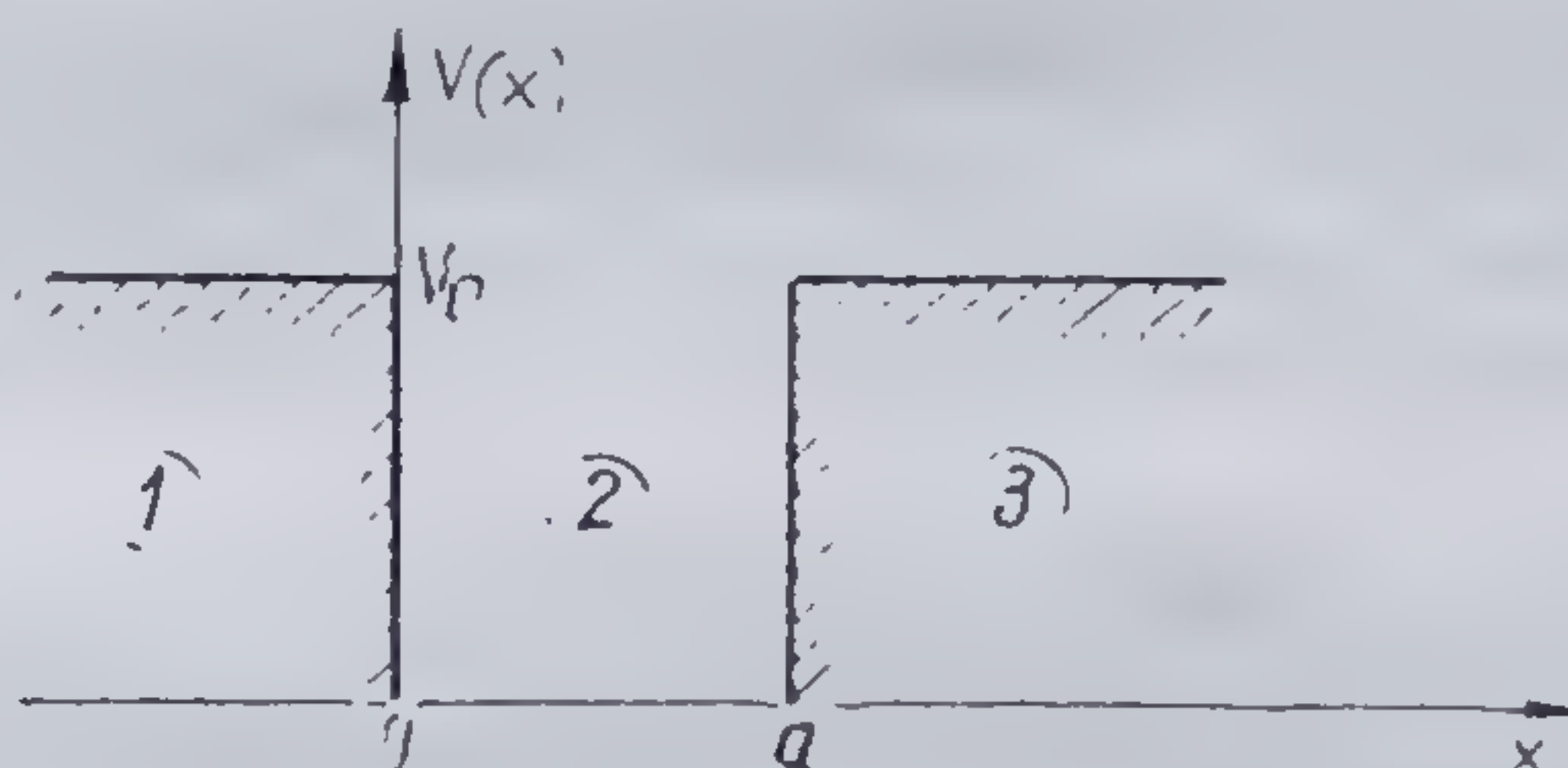


Fig. 8.8.2.

de înălțime finită sau infinită. Pentru o astfel de groapă, cu pereți de înălțime V_0 vom lua

$$V(x) = \begin{cases} V_0; & x < 0 \\ 0; & x \in [0, a] \\ V_0; & x > a. \end{cases} \quad (8.8.10)$$

În cele trei domenii ①, ② și ③ ale spațiului mișcarea cuantică a microparticulei va fi descrisă de ecuațiile

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} - \frac{2m_0}{\hbar^2} (V_0 - E) \psi_1 = 0, \quad \frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} E \psi_2 = 0, \quad \frac{d^2\psi_3}{dx^2} - \frac{2m_0}{\hbar^2} (V_0 - E) \psi_3 = 0 \quad (8.8.11)$$

care, cu notațiile

$$k_1^2 = \frac{2m_0 E}{\hbar^2}, \quad k_2^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2} (V_0 - E), \quad (8.8.12)$$

admit soluții de forma :

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= A_1 e^{-k_1 x} + B_1 e^{k_1 x}, \quad \psi_2(x) = A_2 e^{ik_1 x} + B_2 e^{-ik_1 x} \\ \psi_3(x) &= A_3 e^{k_2(x-a)} + B_3 e^{-k_2(x-a)}.\end{aligned}\quad (8.8.13)$$

Din condițiile standard (8.5.26), respectiv din cerința ca aceste funcții să fie finite, inclusiv pentru $x \rightarrow \infty$, rezultă că trebuie să luăm $A_3 = B_1 = 0$. Se poate de asemenea neglija unda regresivă din domeniul ②, punând $B_2 \simeq 0$. Atunci, condițiile de continuitate a funcției de undă pe suprafețele de discontinuitate ale energiei potențiale $V(x)$ se vor scrie sub forma

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \quad \left(\frac{d\psi_1}{dx}\right)_{x=0} = \left(\frac{d\psi_2}{dx}\right)_{x=0}, \quad \psi_2(a) = \psi_3(a), \quad \left(\frac{d\psi_2}{dx}\right)_{x=a} = \left(\frac{d\psi_3}{dx}\right)_{x=a}.\quad (8.8.14)$$

Din condiția a 3-a și a 4-a, cu ψ_3 și ψ_2 date de (8.8.13), în care s-a pus $A_3 = B_2 = 0$, se obține

$$A_2 \sin k_1 a = B_3 e^{-k_2 a}, \quad k_1 A_2 \cos k_1 a = -k_2 B_3 e^{-k_2 a} \quad (8.8.15)$$

sau prin împărțirea lor

$$\operatorname{tg} k_1 a = -\frac{k_1}{k_2}.\quad (8.8.16)$$

Se observă că o astfel de condiție trece, pentru $V \rightarrow \infty$ (groapă cu pereți infinit de înalți), la forma $\operatorname{tg} k_1 a = 0$ și este satisfăcută numai de valorile

$$k_1 a = n\pi; \quad n = 1, 2, \dots$$

Rezultă deci că pentru energia microparticulei situată în interiorul gropii de potențial se va obține din nou o expresie de forma (8.8.8), adică

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_0} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 n^2; \quad n = 1, 2, \dots \quad (8.8.18)$$

numai că de această dată diferența dintre nivelele energetice cuantificate este apreciabilă (fig. 8.8.3). De exemplu, distanța dintre primele două nivele energetice are pentru electron valoarea

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{m_0 a^2} \simeq 50 \text{ eV}$$

și această valoare crește odată cu n .

Funcțiile de undă care descriu stările cuantice ale microparticulei pe diverse nivele energetice vor putea fi scrise, ținând cont de (8.8.13), sub forma:

$$\psi_{2n}(x) = A \sin \frac{\pi n x}{a}$$

respectiv, impunând condiția de normare (8.5.22), din care rezultă

$$|\psi|^2 = \int_0^a \psi_{2n}^2 dx = A^2 \int_0^a \sin^2 \frac{\pi n x}{a} dx = \frac{a A^2}{2} = 1$$

și deci

$$\psi_{2n}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a}. \quad (8.8.19)$$

Este ușor de demonstrat că aceste funcții formează un set complet de funcții de undă proprii ortonormate pentru operatorul $\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta_x$.

Primele trei funcții ψ_{21} , ψ_{22} , ψ_{23} sînt reprezentate, împreună cu pătratele

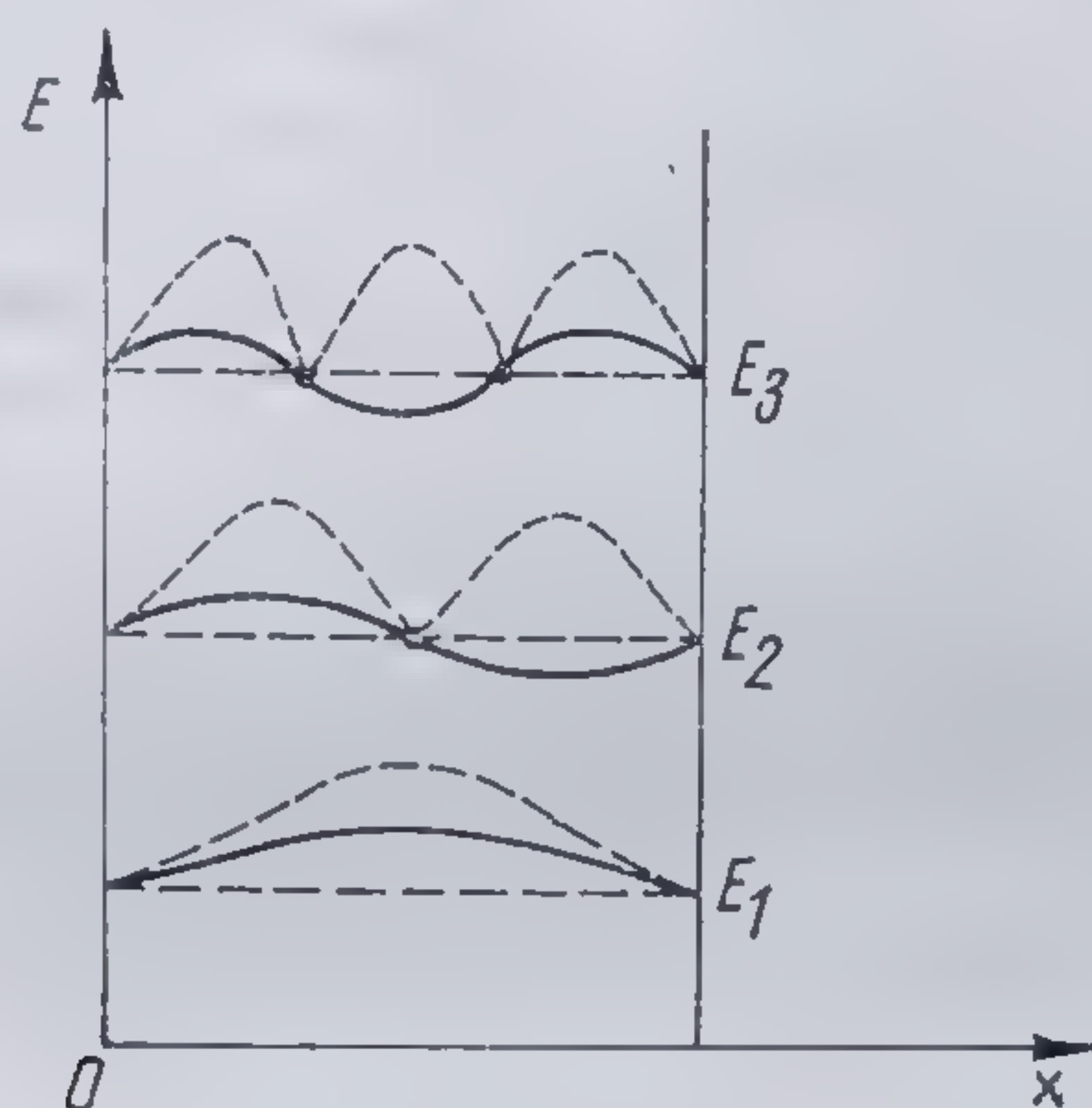


Fig. 8.8.3

modulelor lor, în figura 8.8.3. Se observă că probabilitatea de a găsi micro-particula pe primul nivel E_1 devine maximă pentru $x_1 = \frac{a}{2}$, pentru al doilea nivel este maximă la $x_1 = \frac{a}{4}$ și $x_2 = \frac{3a}{4}$, ș.a.m.d.

8.8.3. GROAPA DE POTENȚIAL TRIDIMENSIONALĂ. METODA SEPARĂRII VARIABILELOR

Modelul simplificat al unei gropi de potențial unidimensionale, expus mai sus, poate fi generalizat ușor la cazul unei gropi tridimensionale, care corespunde situației în care microparticula se poate deplasa liber într-un domeniu tridimensional limitat. Pentru simplitatea tratării, vom alege acest domeniu de formă cubică (fig. 8.8.4) și de dimensiune L macroscopică, punînd

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0; & x, y, z \in [0, L] \\ \infty; & x, y, z \notin [0, L] \end{cases} \quad (8.8.20)$$

Atunci, în interiorul acestui domeniu, ecuația atemporală Schrödinger va fi de forma

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(xyz) + k^2 \psi(xyz) = 0 \quad (8.8.21)$$

unde s-a folosit notația

$$k^2 = \frac{2 m_0 E}{\hbar^2}. \quad (8.8.22)$$

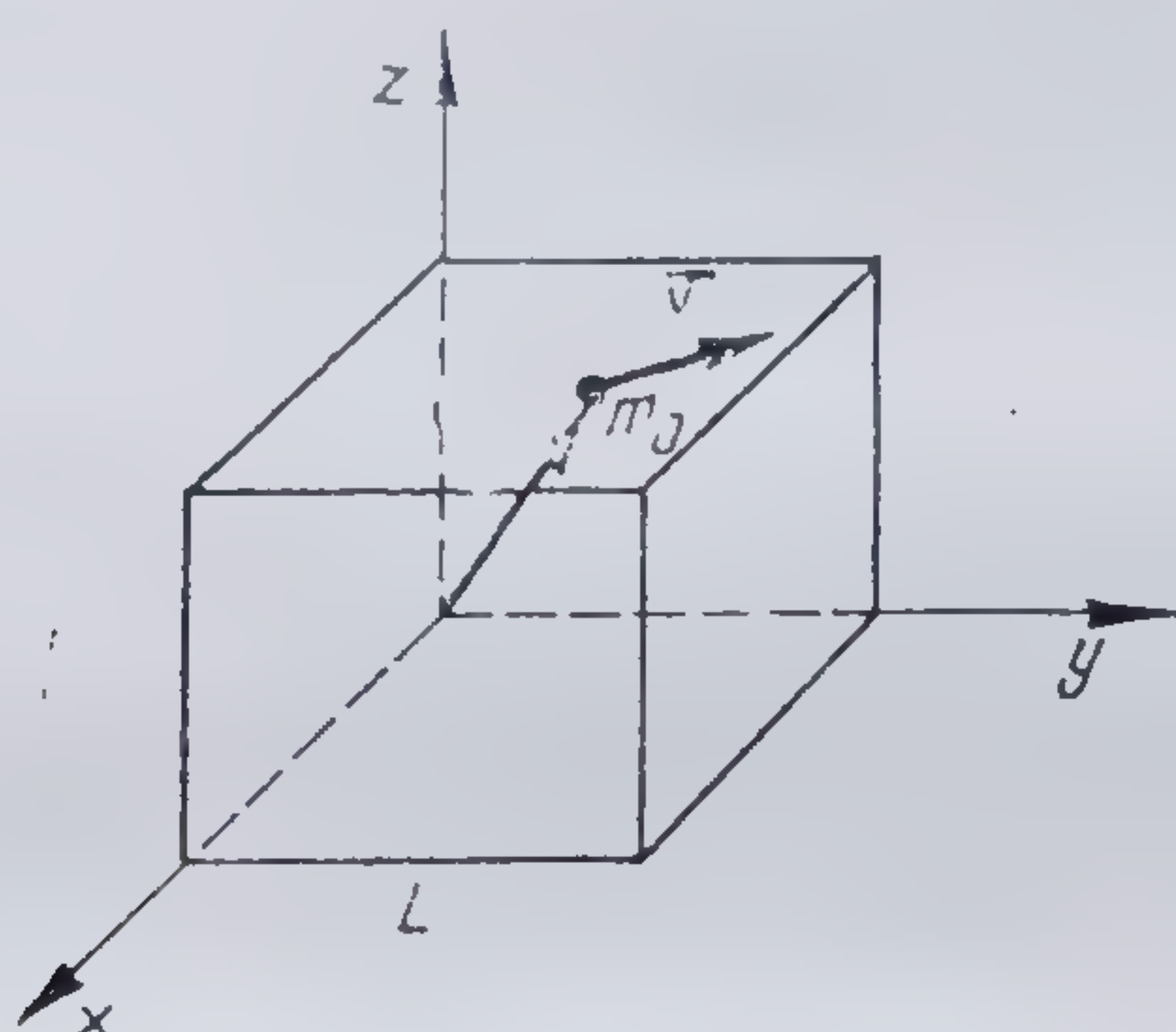


Fig. 8.8.4.

Pentru aflarea soluțiilor acestei ecuații, vom exprima pe $\psi(\mathbf{r})$ sub forma unui produs de trei funcții unidimensionale

$$\psi(x, y, z) = X(x) Y(y) Z(z) \quad (8.8.23)$$

cu care ecuația (8.8.21) ia forma

$$YZ \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + ZX \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + XY \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} + k^2 XYZ = 0. \quad (8.8.24)$$

Prin împărțire cu XYZ rezultă

$$\frac{1}{X} \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} = -k^2 - \frac{1}{Y} \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} - \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2}. \quad (8.8.25)$$

Se observă că membrul întâi al acestei egalități depinde numai de variabila x , iar membrul al doilea numai de y și z , ceea ce înseamnă că fiecare este constant. Dacă se notează cu $-k_x^2$ această constantă, rezultă ecuația

$$\frac{d^2 X}{dx^2} + k_x^2 X = 0 \quad (8.8.26)$$

ale cărei soluții sînt de forma (8.8.19), adică

$$X(x) = \left(\frac{2}{L} \right)^{1/2} \sin \frac{\pi n_x x}{L}. \quad (8.8.27)$$

Soluții analoge se vor obține și pentru $Y(y)$ și $Z(z)$, astfel încît

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} \sin \frac{\pi n_x x}{L} \sin \frac{\pi n_y y}{L} \sin \frac{\pi n_z z}{L}. \quad (8.8.28)$$

va reprezenta setul de funcții proprii ortonormate ale hamiltonianului

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta.$$

De notat că metoda folosită mai sus pentru obținerea soluțiilor ecuației Schrödinger (8.8.21) este cunoscută sub denumirea de *metoda separării variabilelor*. Această metodă este aplicabilă numai atunci cînd stările descrise de cele trei funcții $X(x)$, $Y(y)$ și $Z(z)$ sînt independente între ele (particula execută mișcări de translație libere).

Din (8.8.27) rezultă că funcțiile de undă proprii $\psi_n(\mathbf{r})$ sînt determinate de trei numere cuantice n_x, n_y, n_z , numite *numere cuantice de translație*. Ele determină valorile cuantificate ale energiei microparticulei, întrucît prin înlocuirea expresiilor (8.8.27) în (8.8.24) se obține

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (8.8.29)$$

respectiv cu (8.8.22)

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 n^2; \quad n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2. \quad (8.8.30)$$

Se observă că unei valori E_n îi corespund mai multe funcții proprii. Într-adevăr, de exemplu, pentru $n^2 = 1$, pot exista funcțiile ψ_{100} , ψ_{010} , ψ_{001} , ψ_{-100} , ψ_{0-10} și ψ_{00-1} , deci în total 6 stări distincte care se suprapun peste același nivel energetic E_1 . Se spune că în acest caz nivelul energetic este *degenerat*, numărul de stări g_i corespunzătoare unui singur nivel reprezentînd *gradul de degenerare* al respectivului nivel.

De remarcat, că și în acest caz, pentru dimensiuni L macroscopice, trecerea de la o stare cuantică la alta se face în mod cvasicontinuu (se va putea lua deci $\Delta n = n_{k+1} - n_k \simeq dn$) și, de aceea, se poate vorbi despre o distribuție cvasicontinuuă a stărilor. În aceste condiții, vom calcula o densitate energetică de stări $\rho(E)$, care exprimă numărul de stări existente pe unitate de interval energetic

$$\rho(E) = \frac{d\Gamma}{dE} = \frac{dn_x dn_y dn_z}{dE}. \quad (8.8.31)$$

Pentru o distribuție izotropă, într-un „spațiu (k)” (vezi și § 11.4.4), ținînd cont și de (8.8.29) putem scrie

$$d\Gamma = dn_x dn_y dn_z = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 dk_x dk_y dk_z \quad (8.8.32)$$

sau, avînd în vedere elementul de volum din figura 8.8.5,

$$d\Gamma = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk = \frac{1}{2\pi^2} \mathcal{V} k^2 dk. \quad (8.8.33)$$

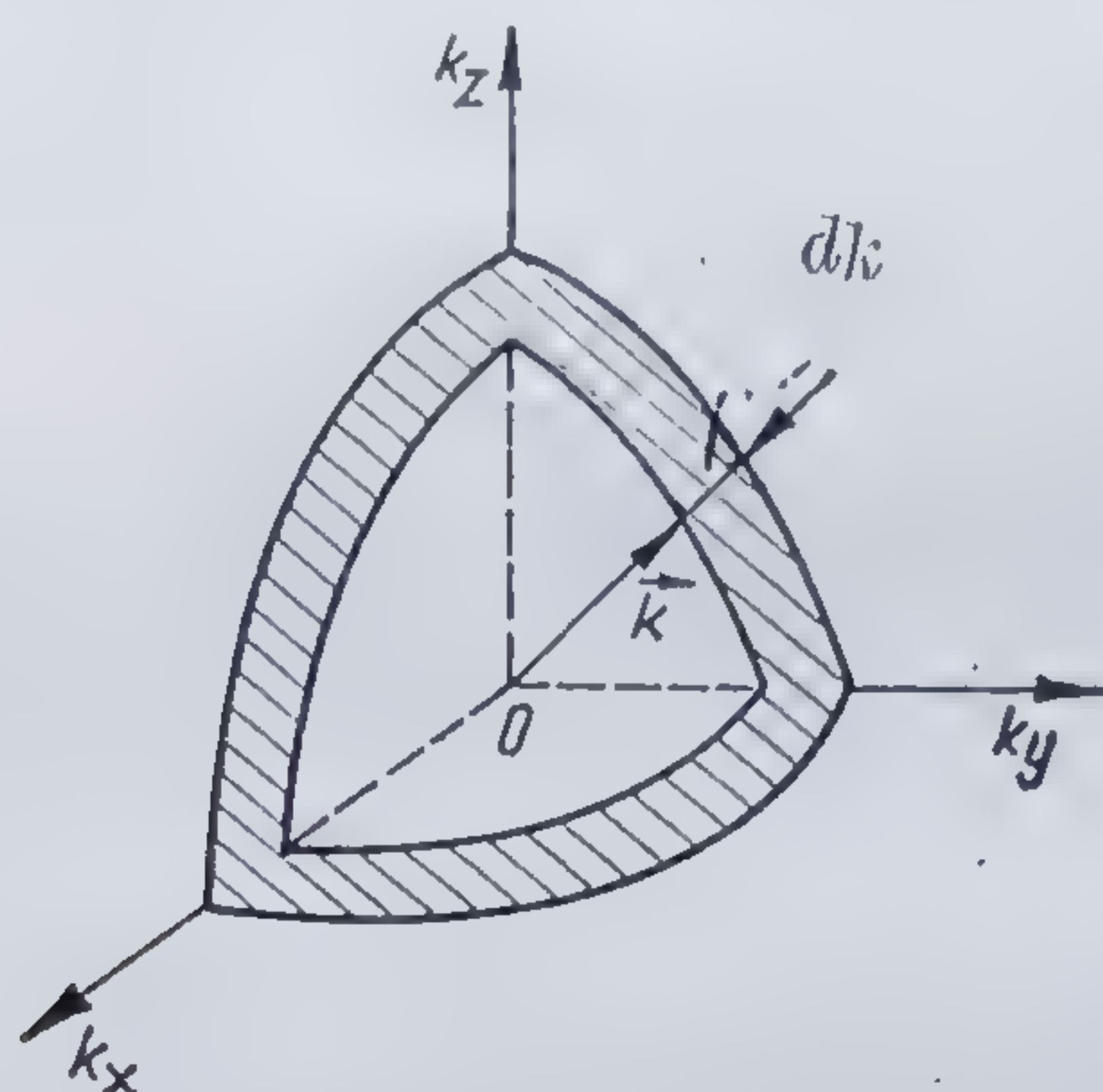


Fig. 8.8.5.

Dar, din (8.8.30), avem $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$, fiecare nivel cuantificat fiind degenerat de g_i ori, așa încît prin calcule simple din (8.8.31) rezultă :

$$\rho(E) = \frac{2\pi g_i}{h^3} (2m_0)^{3/2} E^{1/2} \mathcal{V}. \quad (8.8.34)$$

8.8.4. BARIERA DE POTENȚIAL. EFECTUL TUNEL

Bariera de potențial reprezintă, ca model cuantic, o situație oarecum inversă gropii de potențial, respectiv în cazul unei bariere unidimensionale (fig. 8.8.6) microparticula aflată în stare de mișcare liberă întâlnește într-un

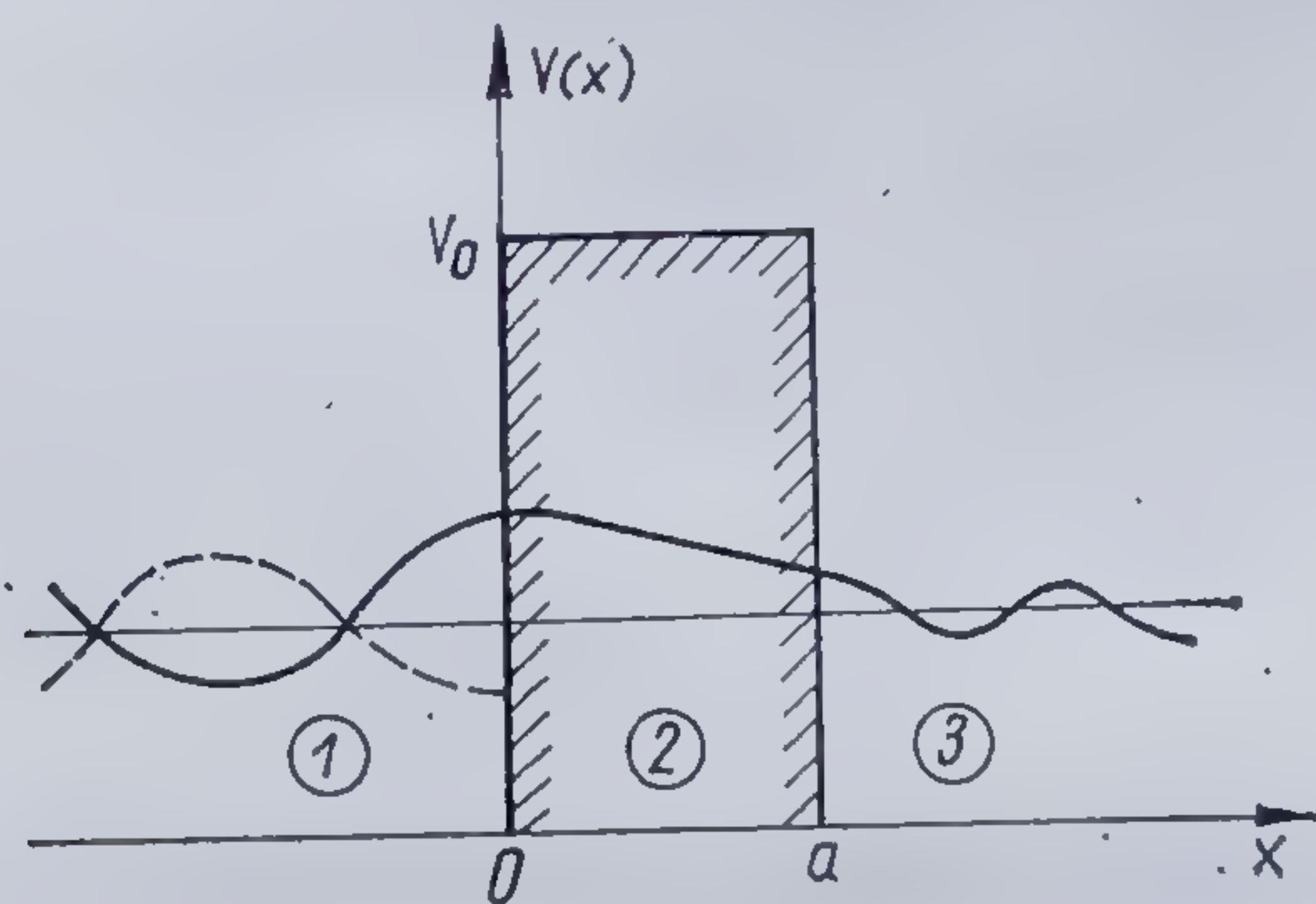


Fig. 8.8.6.

punct $x = 0$ un câmp de forțe repulsive, de potențial $V_0 > E$, extins pe un anumit interval a .

Cu toate că din punct de vedere al mecanicii clasice microparticula nu va reuși niciodată să treacă de această barieră (ar putea s-o treacă prin escaladare, dar numai dacă $E > V_0$), cuantic o astfel de trecere se dovedește a fi posibilă, ea și cum particula ar putea străpunge tuneluri prin barieră.

Cu alte cuvinte, pentru microparticule cuantice, barierele de potențial prezintă o anumită „transparență”, pe care o putem evalua printr-un coeficient de transparență T , definit prin raportul

$$T = \frac{|\psi_3|^2}{|\psi_1|^2}. \quad (8.8.35)$$

Se poate observa că acest raport exprimă probabilitatea de a găsi microparticula dincolo de barieră (în zona 3, fig. 8.8.6), raportată la probabilitatea de a găsi microparticula în fața barierei.

Aflarea funcțiilor de undă ψ_1 și ψ_3 presupune rezolvarea unor ecuații atemporale Schrödinger, de forma

$$\frac{d^2\psi_{1,3}}{dx^2} + \frac{2m_e E}{\hbar^2} \psi_{1,3} = 0, \quad \frac{d^2\psi_2}{dx^2} - \frac{2m_e}{\hbar^2} (V_0 - E) \psi_2 = 0 \quad (8.8.36)$$

ale căror soluții, cu notațiile (8.8.12), sînt

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, & \psi_2(x) &= A_2 e^{-k_2 x} + B_2 e^{k_2 x}, \\ \psi_3(x) &= A_3 e^{-ik_1(x-a)} + B_3 e^{ik_1(x-a)}. \end{aligned} \quad (8.8.37)$$

Desigur și aici, ca și în § 8.8.1, poate fi omisă unda regresivă din zona 3, punînd $B_3 = 0$. Atunci, din condiții la limită de forma (8.8.14) se găsește următorul sistem de ecuații

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2 + B_2, & ik_1(A_1 - B_1) &= k_2(-A_2 + B_2) \\ A_2 e^{k_2 a} + B_2 e^{-k_2 a} &= A_3, & k_2(A_2 e^{k_2 a} - B_2 e^{-k_2 a}) &= ik_1 A_3. \end{aligned}$$

Se observă că din ultimele două, cu $n = k_1/k_2$, pentru $k_2 a \gg 1$, rezultă

$$A_2 = \frac{1 - in}{2} A_3 e^{k_1 a}; \quad B_2 = \frac{1 + in}{2} e^{-k_2 a} \simeq 0$$

iar din primele două

$$A_1 = \frac{n + i}{2n} A_2 = \frac{(1 - in)(n + i)}{4n} A_3 e^{k_1 a}.$$

Cu aceste rezultate pentru coeficientul transparență T al barierei se obține expresia

$$T = \frac{A_3^* A_3}{A_1^* A_1} = \frac{16 n^2}{1 + n^2} e^{-2k_2 a} \quad (8.8.28)$$

sau, dacă se are în vedere că pentru $n \ll 1$, $\frac{16 n^2}{1 + n^2} \simeq 1$,

$$T \simeq e^{-\frac{2a}{\hbar} [2m_e(V_0 - E)]^{1/2}}. \quad (8.8.39)$$

Acest rezultat ne arată că transparența cuantică a unei bariere de potențial depinde exponențial de „înălțimea” $V_0 - E$ a barierei și de „lățimea” ei a .

De notat că teoria tunelării a jucat un rol deosebit în dezvoltarea și folosirea pe scară largă a modelelor cuantice în studiul fenomenelor lumii microcosmice. Pe baza acestui efect au putut fi interpretate fenomene care nu puteau fi explicate în limbajul fizicii clasice și aceasta a condus la progrese însemnate nu numai din punct de vedere teoretic, ci și aplicativ.

Astfel, în anul 1928, Openheimer a explicat, pe baza tunelării, fenomenul de autoionizare a atomilor de hidrogen în câmpuri electrice puternice, iar Fowler și Nordheim au explicat fenomenul de emisie electronică a metalelor în câmpuri electrice intense (emisie electronică la rece, descoperită în anul 1920 de către Lilienfeld), acreditându-se ideea că tunelarea ar apărea numai la barierele „distruse” de acțiunea unor câmpuri electrice exterioare, de intensitate mare.

Dar tot în anul 1928, Gamov, Gurney și Condon reușesc să interpreteze, pe baza efectului tunel, *dezintegrarea* α a nucleelor radioactive naturale, regăsind prin calcule legea experimentală Geiger-Nuttall (pe care fizica clasică nu a reușit s-o obțină). Apoi, în 1929, Rice explică, prin efect tunel, *disocierea moleculară*, dar pasul hotărâtor al dezvoltării teoriei tunelării l-a constituit utilizarea ei în studiul fenomenelor de transport. În 1930, I. Frenkel descrie, pe baza acestui efect, comportarea rezistențelor electrice formate din straturi subțiri de metal-oxid-metal (MOM), în 1932 Frenkel, Ioffe și Nordheim elaborează teoria contactelor MOS (metal-oxid-semiconductor), în 1934, pe baza modelului Kroning-Penney este dezvoltată *teoria benzilor de energie* din solid, iar cu un an mai târziu, pe baza ideii tunelării interzonale, C. Zener explică fenomenele de străpungere electrică a dielectricilor, iar Wilson, Ioffe și Frenkel elaborează *teoria efectului Zener* și a diodelor Zener. Începînd cu anul 1957 se dezvoltă tehnica *spectroscopiei tunelate*, care permite studiul experimental al spectrului fononic și al altor excitații elementare din solid, teoria rezistențelor negative de tip MOM și MOS (L. Esaki), tunelarea multiplă, tunelarea Josephson etc. (vezi cap. XI).

Prezentăm succint în continuare câteva dintre aceste fenomene, a căror interpretare face apel la teoria tunelării.

a) *Dezintegrarea* α . Se știe (vezi §12.5) că acest fenomen, care constă în emiterea spontană a unor particule α (nuclee de heliu) de către nucleele radioactive naturale, este guvernat de o lege de dezintegrare de forma:

$$N = N_0 e^{-\lambda t} \quad (8.8.40)$$

λ fiind *constantă de dezintegrare radioactivă*. Această constantă exprimă probabilitatea ca un nucleu să se dezintegreze în timp de o secundă, fiind o constantă specifică nuclidului radioactiv respectiv. Cercetările experimentale au pus în evidență următoarea relație

$$\ln \lambda = A - B/\sqrt{E}; A, B = \text{constante} \quad (8.8.41)$$

cunoscută sub numele de *legea Geiger-Nuttal*.

În teoria lor, Gamov, Gurney și Condon leagă constanta de dezintegrare λ de transparența barierelor de potențial ce mărginesc nucleele radioactive (fig. 8.8.7), prin relația :

$$\lambda = \nu \cdot T \quad (8.8.42)$$

în care prin ν s-a notat frecvența de ciocnire a particulei α de unul dintre pereții barierei. Se admite de asemenea că particula α preexistă în nucleu, unde are o lungime de undă asociată egală cu diametrul $2R$ al acestuia

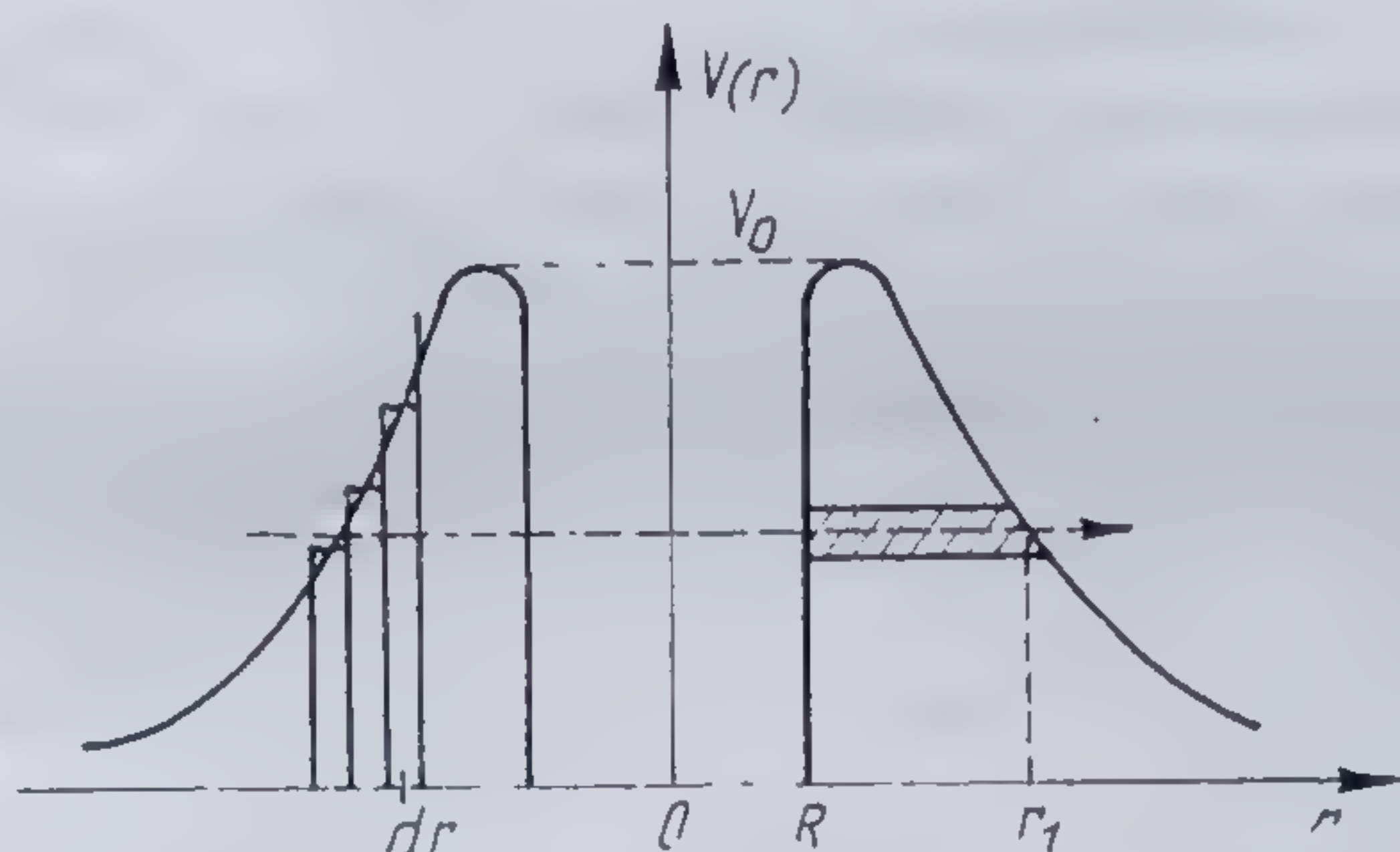


Fig. 8.8.7.

($h/m_\alpha v_\alpha = 2R$). Atunci, întrucît ν reprezintă inversul intervalului de timp necesar particulei pentru a ciocni succesiv un perete al barierei ($\nu = 1/\Delta t = v_\alpha/2R$), iar T este dat de o expresie de forma (8.8.39), pentru o barieră coulombiană ($V(r) = 2Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$), împărțită în bariere rectangulare de potențial infinitezimale, de lățime dr (fig. 8.8.7), se va putea scrie expresia :

$$\lambda = \frac{h}{4m_\alpha R^2} e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m_\alpha} \int_R^{r_1} \left[\frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} - E \right]^{1/2} dr}$$

în care limita de integrare r_1 se găsește din condiția $V(r_1) = E$ și este dată de expresia : $r_1 = 2Ze^2/4\pi\epsilon_0 E$. Efectuînd integrarea, se obține

$$\ln \lambda = \ln \frac{h}{4m_\alpha R^2} + \frac{16\pi e}{h} \sqrt{m_\alpha z} R - \frac{2Ze^2}{h^2} \sqrt{\frac{2m_\alpha}{E}}. \quad (8.8.43)$$

Se observă că această expresie este de forma legii Geiger-Nuttal (8.8.41). Calculele în cadrul unui model nuclear extins spațial [114] conduc la

formula

$$\ln \lambda = \ln \frac{h}{4m_\alpha R^2} + \frac{16\pi e}{h} \sqrt{m_\alpha z R} - \frac{2ze^2}{h^2} \sqrt{\frac{2m_\alpha}{E}} - \frac{8\pi E^2}{15 h z^3 e^4} \sqrt{2m_\alpha E \left(\frac{2ze^2}{ER} - 1 \right)} \quad (8.8.44)$$

care apropie și mai mult valorile calculate pentru λ de cele experimentale.

b) *Emisia la rece.* În §8.2 s-a demonstrat că electronii de conducție pot fi scoși dintr-un metal dacă li se comunică o energie egală cu lucrul de extracție. O astfel de energie poate fi transmisă prin încălzirea metalului, când se obține o *emisie termoelectronică* (§9.5), prin efect fotoelectric (§8.2) sau prin intermediul unui câmp electric E , când se obține o *emisie electronică la rece*. Se știe că electronii de valență ai unui metal populează subnivelele unei benzi permise pînă la un subnivel de energie maximă E_F , care pentru $T = 0K$ reprezintă *nivelul Fermi* (§9.5.)

Energia unui electron situat pe nivelul Fermi este desigur mai mică decît energia electronilor liberi din afara metalului, tocmai cu energia de extracție Φ_e (fig. 8.8.8). Un astfel de electron nu va putea părăsi meta-

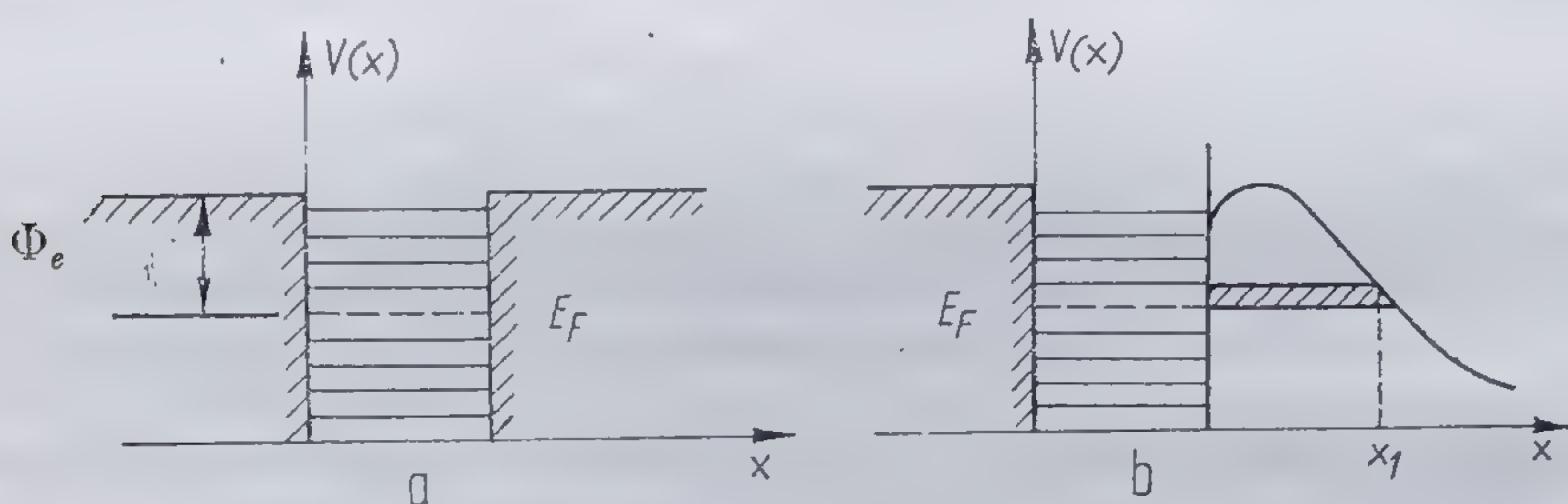


Fig. 8.8.8.

lul, trecînd prin bariera de potențial de la suprafața acestuia, întrucît respectiva barieră are o grosime infinit de mare (fig. 8.8.8, a). Se constată ușor însă că prin acțiunea unui câmp electric E , aplicat în lungul direcției Ox , energia potențială $V(x)$ se reduce în conformitate cu relația

$$V(x) = V_0 - e|E|x \quad (8.8.45)$$

asa încît la suprafața metalului se creează o barieră de potențial de grosime finită (fig. 8.8.8, b), care va putea fi tunelată de către electronii de conducție. Fluxul de electroni, care vor părăsi metalul sub acțiunea câmpului E , va fi dat atunci de expresia

$$J = J_0 T = J_0 \cdot e^{-\frac{2}{h} \sqrt{2m_e} \int_0^{x_1} (V_0 - E - e|E|x)^{1/2} dx}$$

Prin calcule simple se obține

$$J = J_0 \cdot e^{-\frac{E_0}{|E|}}; \quad E_0 = \frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m_e}(V_0 - E)^{3/2}}{eh}. \quad (8.8.46)$$

Această relație este bine verificată de experiență. De observat că o astfel de relație pune în evidență o curbă volt-amperică neliniară.

c) *Diferența de potențial de contact și rezistențele MOM.* O diferență de potențial electric apare la contactul intim dintre două metale diferite, ale căror nivele Fermi sînt de energii diferite (fig. 8.8.9, a). Acest fenomen se datorește faptului că o parte dintre electronii de conducție ai metalului ② trece în metalul ① pînă cînd cele două nivele Fermi se egalizează. Dar, în urma acestor treceri, metalul ① se va încărca negativ (va avea un surplus de electroni), iar metalul ② pozitiv, întreprinzînd diferența de potențial:

$$\Delta\varphi = \varphi_2 - \varphi_1 = \frac{1}{e}(\Phi_{e2} - \Phi_{e1}) \quad (8.8.47)$$

denumită diferență de potențial de contact.

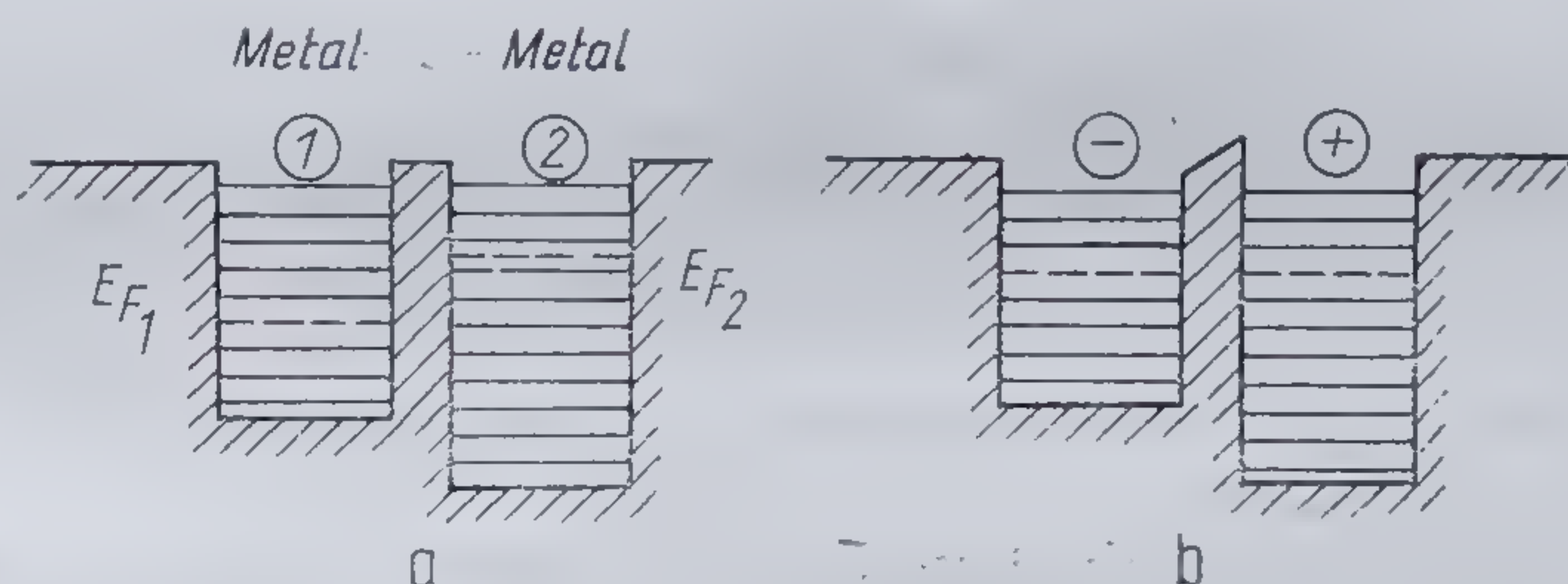


Fig. 8.8.9.

Desigur că dacă între cele două metale se va găsi un strat subțire de oxid, trecerile electronilor se vor face prin tunelare, obținîndu-se astfel o rezistență (MOM).

d) *Efectul Zener.* Apare la diode semiconductoare cu joncțiune $p-n$ (§11.5.2), la polarizări inverse puternice ($U > U_c$, fig. 8.8.10, b) și constă

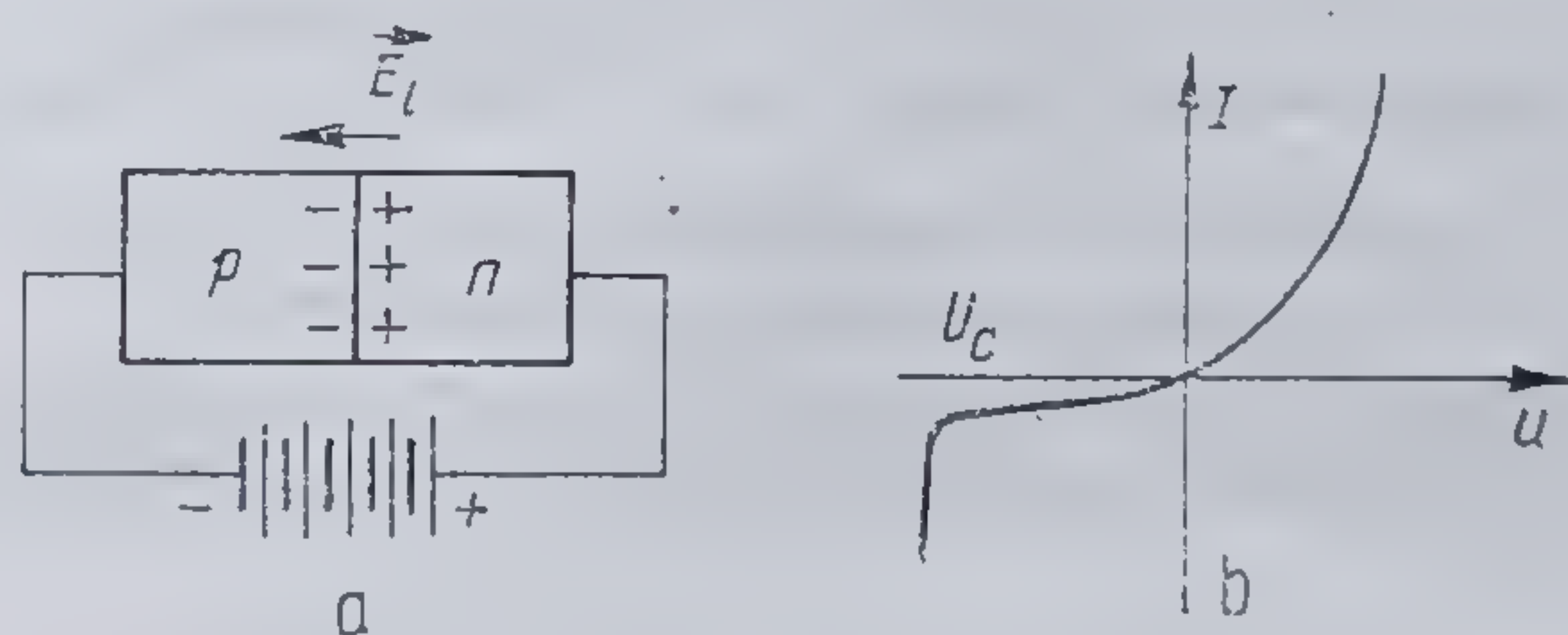


Fig. 8.8.10.

în generarea unor curenți de intensități ridicate, care nu modifică sensibil tensiunea diodei. Procesul se datorește tunelării joncțiunii $p-n$ de către electronii din zona n și de către golurile din zona p .

8.8.5. TUNELAREA SUCCESIVĂ A MAI MULTOR BARIERE DE POTENȚIAL ECHIDISTANTE. MODELUL KRONING — PENNEY

Studiul unui astfel de mecanism de tunelare succesivă a fost întreprins cu scopul de a se obține informații asupra mecanismului de conducție (electrică și termică) a metalelor. Ioni metalici dintr-o rețea cristalină creează în jurul lor un câmp potențial de forțe, cu variație periodică, (§11.3.1), ce poate fi modelat, pentru cazul unidimensional, printr-o succesiune continuă de gropi și bariere de potențial rectangulare și identice între ele, așa cum sînt schițate în fig. 8.8.11.

Pentru a cunoaște starea cuantică de mișcare a electronului într-un astfel de caz va trebui să găsim funcția de undă $\psi_n(x)$ care descrie respec-

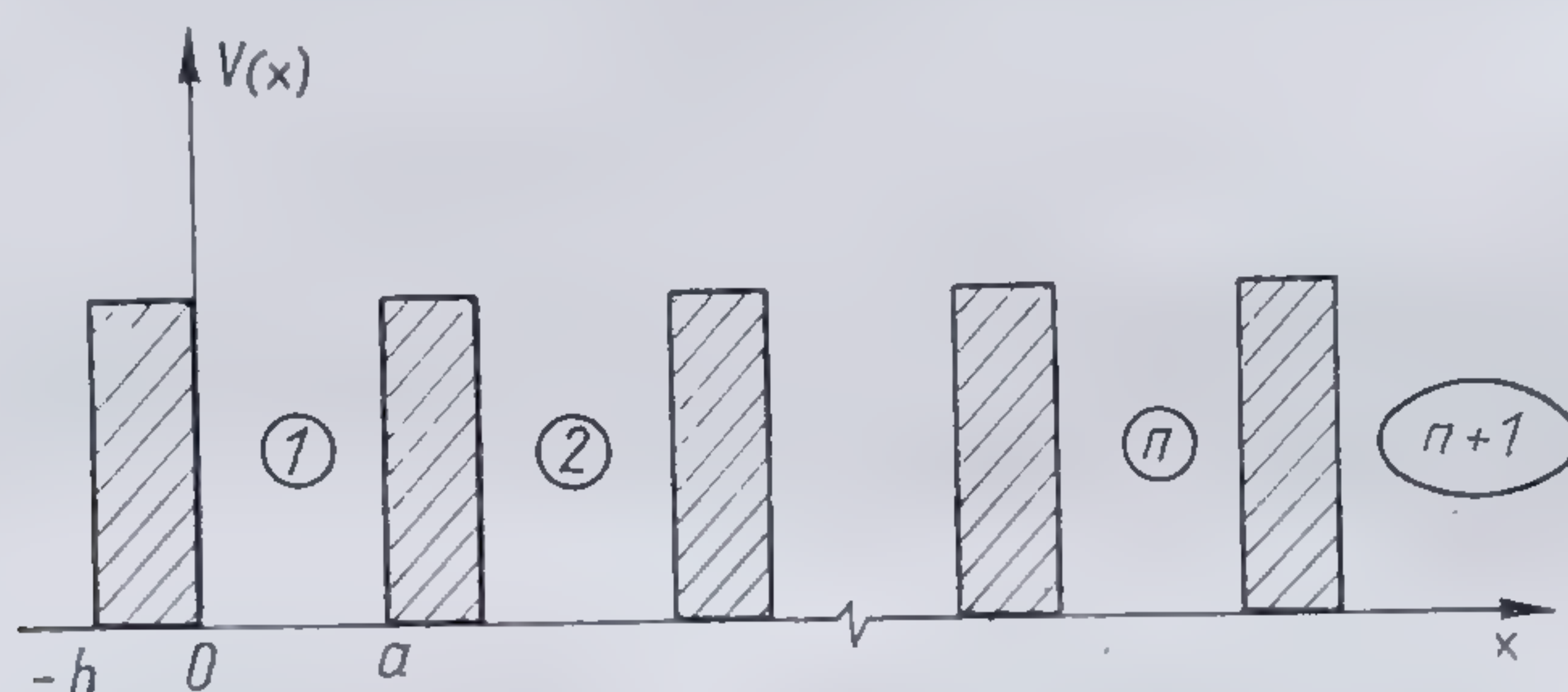


Fig. 8.8.11.

tiva stare. Vom putea distinge și aici cele două situații, când electronul se găsește în cadrul unei gropi de potențial, de lățime a și $V(x) = 0$, respectiv a unei bariere de potențial de lățime b și înălțimea $V(x) = V_0$. Din cele două ecuații Schrödinger

$$\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} E \psi_n = 0; \quad \frac{d^2\psi'_n}{dx^2} - \frac{2m_e}{\hbar^2} (V_0 - E) \psi'_n = 0 \quad (8.8.48)$$

se obțin funcții de forma

$$\psi_n(x) = A_n \sin k_1 x_n + B_n \cos k_1 x_n;$$

$$\psi'_n(x) = A'_n \operatorname{sh} k_2(x_n - d) + B'_n \operatorname{ch} k_2(x_n - d). \quad (8.8.49)$$

Aici k_1 și k_2 au semnificația dată de (8.8.12), iar $x_n = x - n(a + b) = x - nd$, d fiind constanta rețelei unidimensionale.

Desigur, funcțiile de undă (8.8.49) vor descrie starea cuantică a electronului în oricare dintre punctele rețelei. De exemplu, pentru groapa $n + 1$ vom avea

$$\psi_{n+1}(x) = A_{n+1} \sin k_1 x_{n+1} + B_{n+1} \cos k_1 x_{n+1} \quad (8.8.50)$$

în care $x_{n+1} = x - (n + 1)d$.

Valorile coeficienților A_n , B_n , A'_n și B'_n , care intră în aceste funcții se determină din condiții de continuitate de forma (8.8.14), impuse func-

țiilor de undă pe pereții barierelor de potențial. Astfel, pentru $x = nd + a$, ceea ce înseamnă $x_n = x - nd = a$, respectiv $x_n - d = -b$, vor trebui să fie satisfăcute egalitățile

$$A_n \sin k_1 a + B_n \cos k_1 a = -A'_n \operatorname{sh} k_2 b + B'_n \operatorname{ch} k_2 b \quad (8.8.51)$$

$$A_n \cos k_1 a - B_n \sin k_1 a = \frac{k_2}{k_1} (A'_n \operatorname{ch} k_2 b - B'_n \operatorname{sh} k_2 b).$$

În mod analog, pe peretele următor al barierei, pentru care $x = (n+1)d$ (și deci $x_n = x - nd = d$; $x_n - d = 0$), se vor obține egalitățile

$$B'_n = B_{n+1}; \quad A'_n = \frac{k_1}{k_2} A_{n+1}. \quad (8.8.52)$$

Dacă se are în vedere că odată cu $V_0 \rightarrow \infty$ și $b \rightarrow 0$ parametrul

$$P = \frac{k_2^2 ab}{2} \quad (8.8.53)$$

(care exprimă o măsură a ariei unei bariere de potențial) rămâne constant, și că în (8.8.51) se pot face aproximațiile: $\operatorname{ch} k_2 b \rightarrow 1$ și $\operatorname{sh} k_2 b \simeq k_2 b$, atunci ținând cont și de (8.8.52) și (8.8.53) egalitățile (8.8.51) capătă forma

$$\begin{aligned} A_n \sin k_1 d + B_n \cos k_1 d &= B_{n+1} \\ A_n \cos k_1 d - B_n \sin k_1 d &= A_{n+1} - \frac{2P}{k_1 d} B_{n+1} \end{aligned} \quad (8.8.54)$$

Pentru a găsi soluțiile acestui sistem de ecuații, vom exprima pe A_n și B_n prin intermediul altui parametru r , și anume

$$A_n = C_1 r^n; \quad B_n = C_2 r^n \quad (8.8.55)$$

C_1 și C_2 fiind două noi constante. Atunci, sistemul (8.8.54), după simplificarea cu r se va reduce la forma

$$C_1 \sin k_1 d = C_2 (r - \cos k_1 d) \quad (8.8.56)$$

$$C_2 \left(\frac{2P}{k_1 d} r - \sin k_1 d \right) = C_2 (r - \cos k_1 d)$$

Condiția ca acest sistem de ecuații în C_1 și C_2 să posede soluții nebanale este ca determinantul său principal să fie nul, condiție din care rezultă

$$r^2 - 2r \cos kd + 1 = 0. \quad (8.8.57)$$

Aici s-a notat

$$\cos kd = \frac{P}{k_1 d} \sin k_1 d + \cos k_1 d. \quad (8.8.58)$$

Se observă că ecuația (8.8.57) are următoarele soluții

$$r_{12} = \cos kd \pm i \sin kd = e^{\pm i kd} \quad (8.8.59)$$

Lăsînt în continuare arbitrară numai una dintre constantele C_1 și C_2 (de exemplu $C_2 = C_0$), din (8.8.56) se obține

$$C_1 = C_0 \frac{r - \cos k_1 d}{\sin k_1 d} \quad (8.8.60)$$

și deci

$$A_n = C_0 \frac{(e^{ikd} \cos k_1 d) e^{iknd}}{\sin k_1 d}; \quad B_n = C_0 e^{iknd}. \quad (8.8.61)$$

Cu aceste rezultate, pentru funcția de undă $\psi_n(x)$ se va obține o expresie de forma

$$\psi_n(x) = C_0 e^{ikx_n} u_k(x_n) \quad (8.8.62)$$

în care prin $u_k(x_n)$ s-a notat funcția periodică

$$u_k(x_n) = \frac{1}{\sin k_1 d} [e^{-ik(x_n-x)} \sin k_1 x_n - e^{-ikx_n} \sin k_1(x_n - d)] \quad (8.8.63)$$

Se verifică ușor că, într-adevăr: $u_k(x_n + d) = u_k(x_n)$.

O funcție de undă de forma

$$\psi_k(x) = u_k(x) e^{ikx} \quad (8.8.64)$$

în care amplitudinea $u_k(x)$ variază periodic cu perioada d a rețelei, este cunoscută sub denumirea de *funcție de undă de tip Bloch*. Ea descrie stările cuantice ale microparticulelor din structuri cu simetrii periodice, evidențiindu-se prin intermediul densității de probabilitate

$$w_k(x) = \psi_k^* \psi_k = u_k^* u_k \quad (8.8.65)$$

că aceste microparticule „simt” structura respectivei rețele (fig. 8.8.12).

Nu trebuie uitat, însă, că valorile lui k date de (8.8.62), sînt supuse condiției restrictive (8.8.58). Se observă că aceste valori sînt determinate

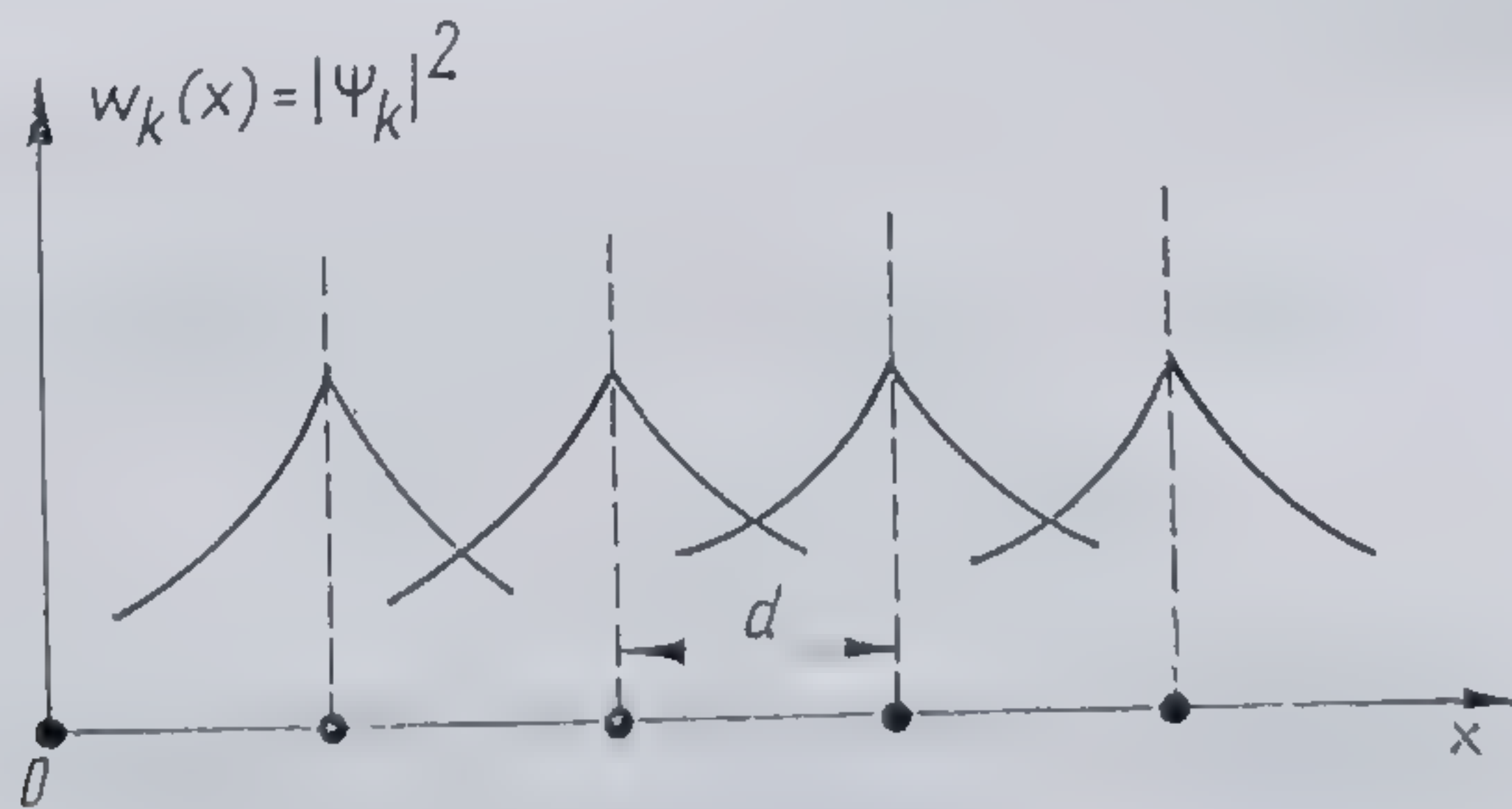


Fig. 8.8.12

în mod esențial de parametrul P , respectiv de înălțimea și lățimea barierelor de potențial. Atunci, desigur că înseși valorile pe care le va parcurge energia E_k a microparticulei vor fi supuse unor condiții restrictive, întrucât s-a văzut că :

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \quad (8.8.66)$$

Dacă, de exemplu, se ia $P = 0$, ceea ce înseamnă că barierele de potențial lipsesc, atunci din (8.8.58) rezultă $k = k_1$, ceea ce înseamnă că electronul se va comporta ca un electron liber, a cărui energie

$$E(k_1) = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_e} \quad (8.8.67)$$

variază continuu cu k_1 , după o lege de tip parabolic (fig. 8.8.13).

Pentru cazul cînd $P = \infty$ (bariere infinit de înalte) condiția (8.8.58) va fi satisfăcută numai dacă $\sin k_1 d = 0$, respectiv numai pentru valori

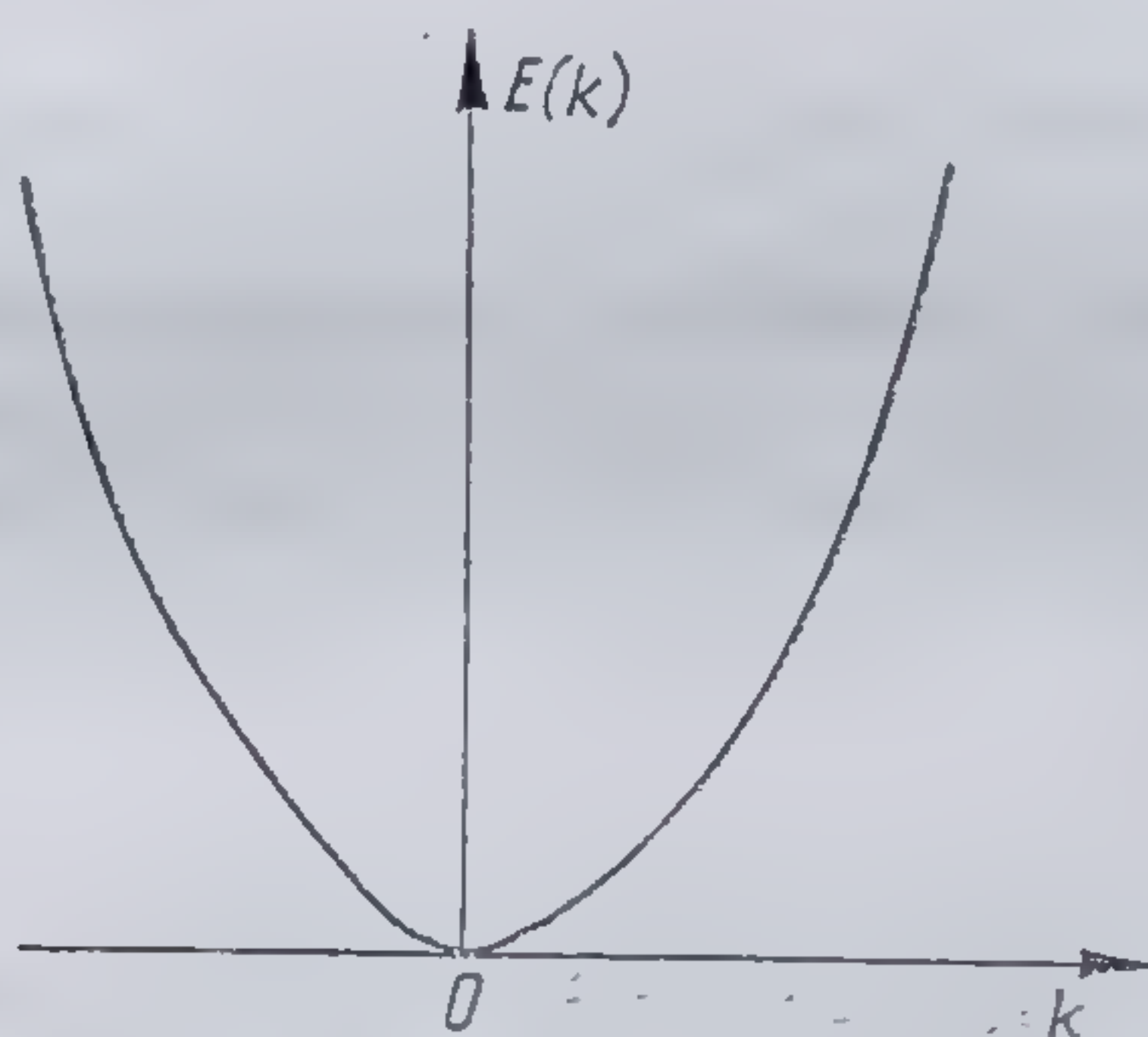


Fig. 8.8.13

discrete $k_1 d = n\pi$ (cu $n = 1, 2, \dots$), care vor determina valori cuantificate pentru E_n , întocmai ca și în cazul grupilor cuantice de potențial.

În sfîrșit, pentru cazul intermediar, cînd $0 < P < \infty$, reprezentînd grafic funcția

$$y = \frac{2P \sin k_1 d}{k_1 d} + \cos k_1 d \quad (8.8.68)$$

se observă (fig. 8.8.14) că condiția (8.8.58) este satisfăcută numai pentru acele valori ale lui k_1 pentru care $y \in [-1, 1]$. Aceasta înseamnă că în șirul valorilor lui $E(k)$ vor interveni porțiuni „permise” și porțiuni „interzise” (după cum condiția (8.8.58) este îndeplinită sau nu). În felul acesta s-a ajuns la descoperirea *benzilor interzise* din spectrul energetic al solidului. Punerea în evidență pe cale experimentală a acestor benzi interzise a constituit un succes deosebit al teoriei cuantice.

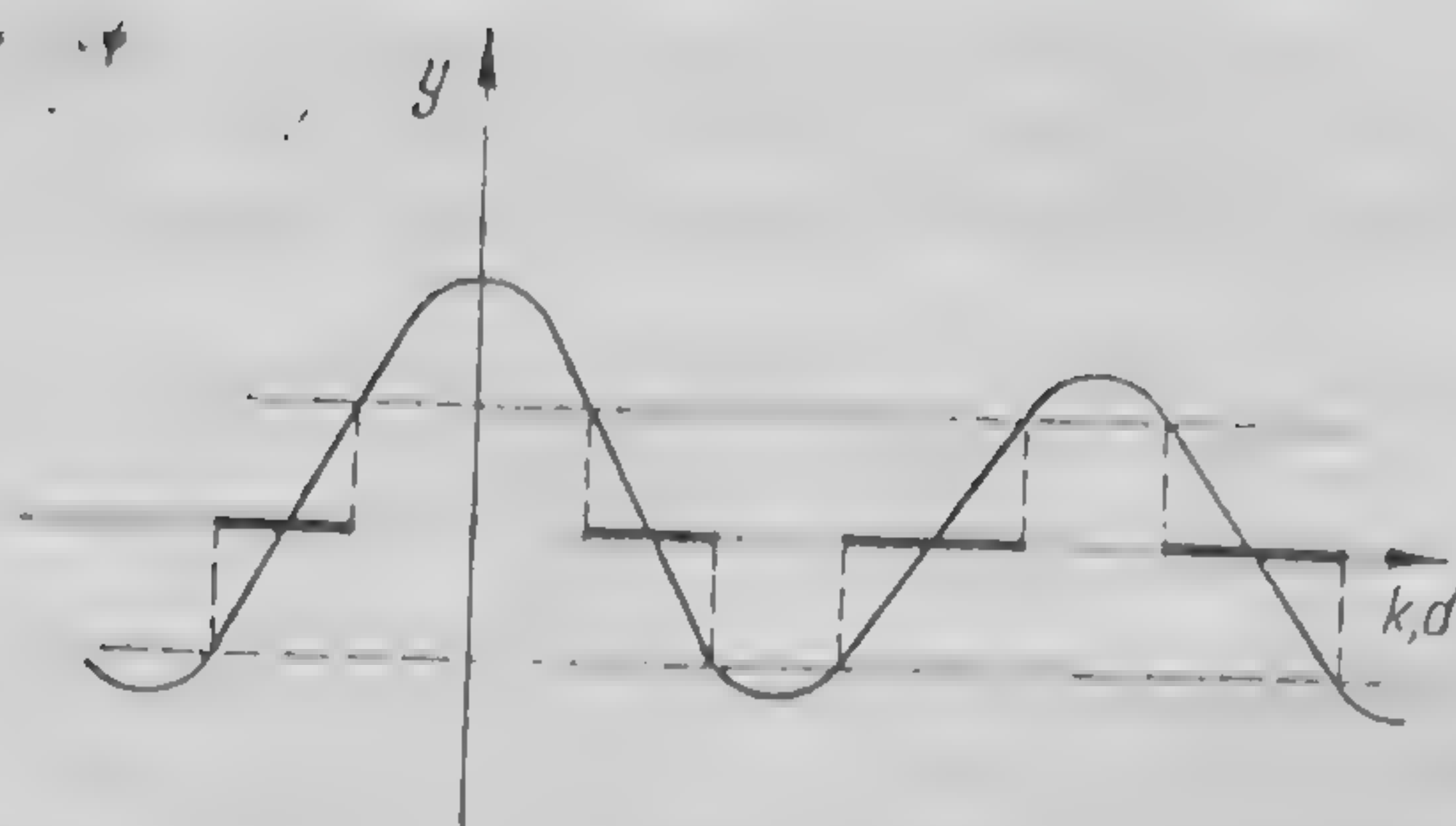


Fig. 8.8.14

De remarcat că stările interzise intervin la acele valori k_d , pentru care este îndeplinită condiția

$$|\cos k_d d| = 1 \quad (8.8.69)$$

și deci

$$k_d = \pm \frac{n\pi}{d}; \quad n = 1, 2, \dots \quad (8.8.70)$$

La aceste valori, în spectrul energetic apar salturi de forma celor schițate în figura 8.8.15 (vezi și §11.3.1) care pun în evidență existența benzilor de energie permise și interzise. În figura 8.8.16 este redată dependența

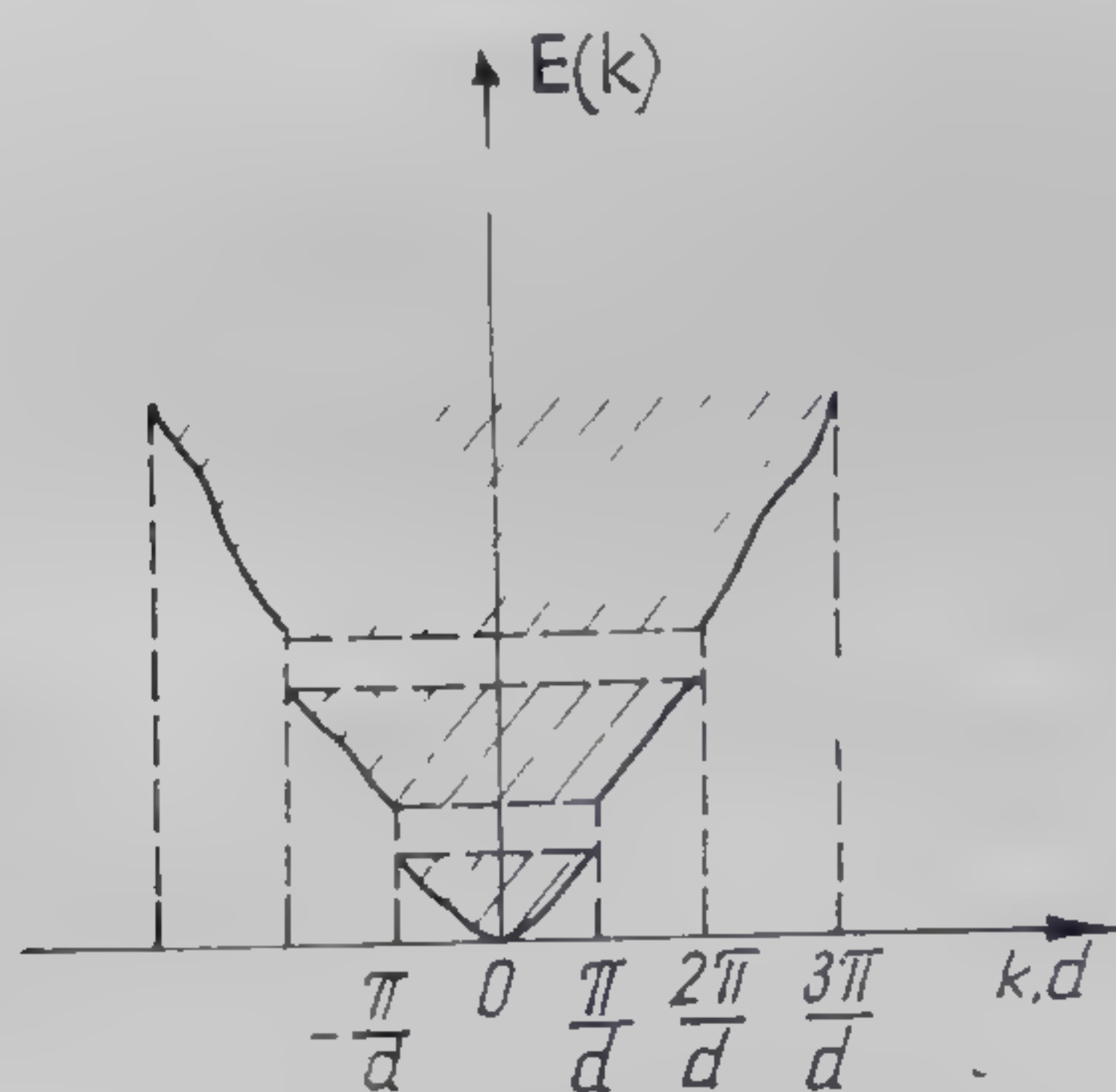


Fig. 8.8.15

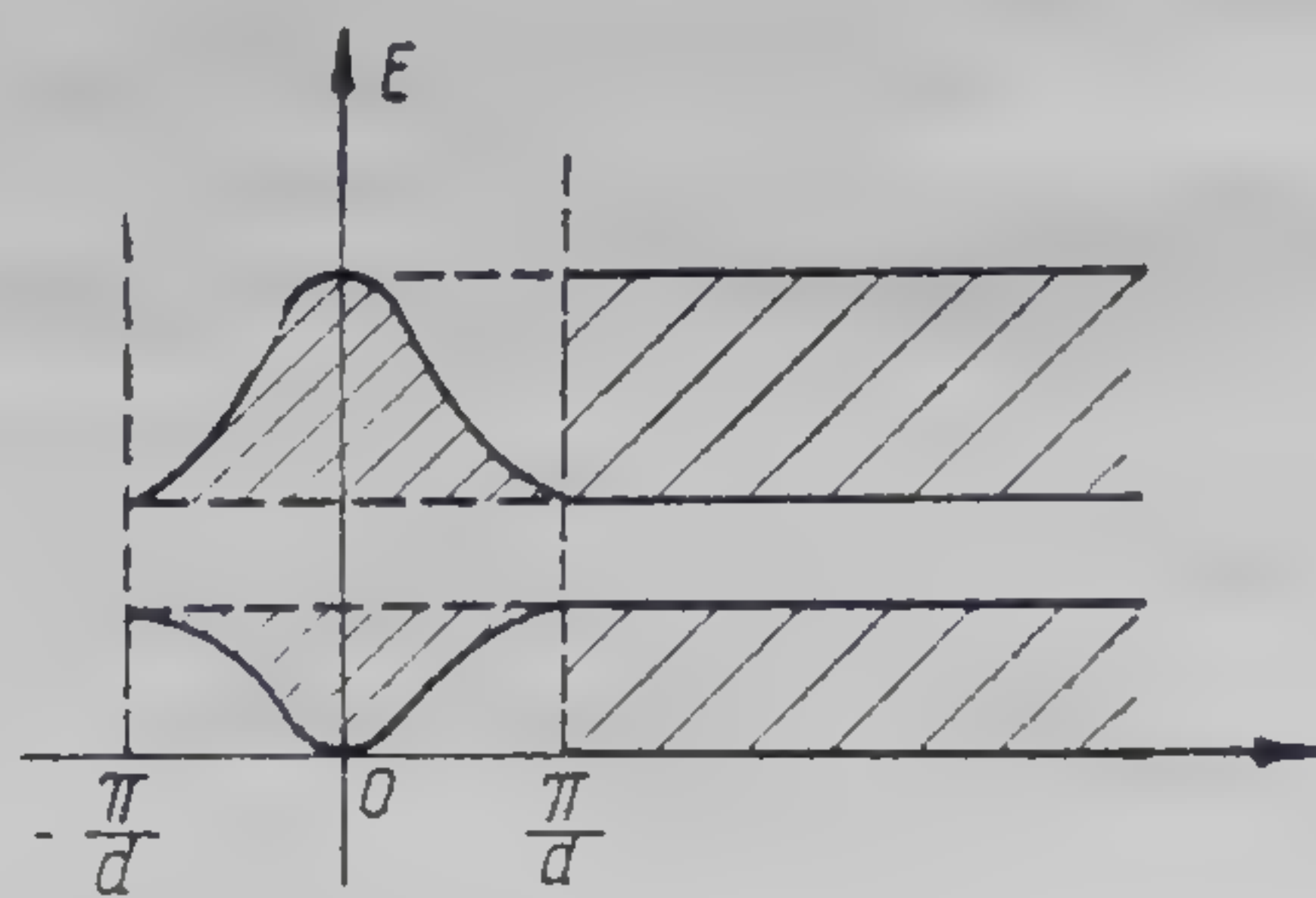


Fig. 8.8.16

$E = E(k)$, redusă la primul interval $k \in \left[-\frac{\pi}{d}, \frac{\pi}{d}\right]$ de valori permise (așa-numita primă zonă Brillouin, vezi §11.2.2), iar alăturat, schema benzilor permise (prezentate hașurat) și a celor interzise (nehașurate) într-o diagramă de tip Grotrien.

Mai trebuie remarcat și faptul că din condiția de periodicitate a funcției de undă rezultă, pentru un lanț format din N bariere de poten-

țial echidistante, că fiecare bandă energetică permisă este formată din N subnivele energetice foarte apropiate între ele. Într-adevăr, cu $L = Nd$, din condiția Born-Kármán

$$\psi(x + L) = \psi(x) \quad (8.8.71)$$

luând pe $\psi(x)$ de forma (8.8.64), rezultă,

$$e^{ik(x+Nd)} u_k(x + Nd) = e^{ikx} u_k(x) \quad (8.8.72)$$

din care, ținând cont că $u_k(x + Nd) = u_k(x)$, se obține

$$e^{ikNd} \equiv 1, \quad (8.8.73)$$

condiție satisfăcută numai dacă

$$k = \frac{2\pi n}{Nd}; \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (8.8.74)$$

Valoarea maximă pe care o poate lua numărul cuantic n va rezulta din cerința ca intervalul maxim al valorilor lui k să fie egal cu $\frac{2\pi}{d}$,

adică să corespundă primei zone Brillouin. Deci într-o zonă permisă vor exista atâtea subnivele permise cîte noduri are respectiva rețea cristalină, deoarece

$$n_{max} = N. \quad (8.8.75)$$

8.8.6. MIȘCAREA CUANTICĂ A OSCILATORULUI LINIAR ARMONIC

În §1.7.1 s-a văzut că oscilatorul liniar armonic este un punct material de masă m_0 , animat de o mișcare oscilatorie de către o forță elastică $F_e = -k_e x$. Legea clasică a mișcării este de forma

$$x(t) = A \sin(\omega t + \varphi); \quad \omega = (k_e/m_0)^{1/2} \quad (8.8.76)$$

și se poate obține din următoarea funcție hamiltoniană

$$H = \frac{p_x^2}{2m_0} + \frac{m_0 \omega^2 x^2}{2}, \quad (8.8.77)$$

Este de remarcă faptul că întrucît acest hamiltonian nu conține variabila t , energia totală E a oscilatorului va rămîne constantă în timp.

Legile cuantice ale mișcării unui oscilator liniar armonic se vor obține, desigur, din rezolvarea unei ecuații Schrödinger atemporală, de forma

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m_0}{h^2} \left(E - \frac{m_0\omega^2 x^2}{2} \right) \psi = 0. \quad (8.8.78)$$

Pentru a obține soluțiile acestei ecuații, vom folosi notațiile

$$\alpha = \frac{2m_0 E}{h^2}; \quad \beta = \frac{m_0\omega}{h} = \frac{1}{x_0^2}; \quad \lambda = \frac{\alpha}{\beta} = \frac{2E}{h\omega} \quad (8.8.79)$$

și vom face următoarea schimbare de variabilă

$$\xi = \frac{x}{x_0}. \quad (8.8.80)$$

Atunci, după calcule simple [8], ecuația (8.8.78) va lua forma

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2) \psi = 0. \quad (8.8.81)$$

Se observă că la limita $\xi \rightarrow \infty$ se poate afla imediat o soluție asimptotică ψ_∞ , din ecuația

$$\frac{d^2\psi_\infty}{d\xi^2} - \xi^2 \psi_\infty = 0 \quad (8.8.82)$$

care este de forma

$$\psi_\infty = \psi_0 e^{c\xi^2}. \quad (8.8.83)$$

Din cerința ca această funcție să verifice ecuația (8.8.82) rezultă două valori

$$c = \pm \frac{1}{2} \quad (8.8.84)$$

astfel încît :

$$\psi_\infty(\xi) = \psi_0 e^{-\frac{1}{2}\xi^2} + \psi'_0 e^{+\frac{1}{2}\xi^2}. \quad (8.8.85)$$

Dar al doilea termen trebuie luat zero ($\psi'_0 = 0$) pentru ca funcția $\psi_\infty(\xi)$ să rămână finită la $\xi \rightarrow \infty$. Prin urmare

$$\psi_\infty(\xi) = \psi_0 e^{-\frac{1}{2}\xi^2}. \quad (8.8.86)$$

Pentru aflarea soluției ecuației (8.8.81) este convenabil să introducem funcția $u(\xi)$, definită prin expresia

$$\psi(\xi) = \psi_0 e^{-\frac{1}{2}\xi^2} u(\xi) \quad (8.8.87)$$

pentru care, prin înlocuire în (8.8.81), se va obține ecuația

$$\frac{d^2 u}{d\xi^2} - 2\xi \frac{du}{d\xi} + (\lambda - 1) u = 0. \quad (8.8.88)$$

Căutăm pentru această ecuație soluții, sub forma unei serii de puteri

$$u(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} b_j \xi^j \quad (8.8.89)$$

care prin introducerea în (8.8.88) conduce la condiția

$$\sum_j b_j \{j(j+1)\xi^{j-2} - [(2j+1)-\lambda]\xi^j\} = 0.$$

Grupînd aici termenii în ξ^v se va obține

$$\xi^v [b_{v+2}(v+2)(v+1) - b_v(2v+1-\lambda)] = 0 \quad (8.8.90)$$

din care rezultă următoarea formulă de recurență :

$$b_{v+2} = b_v \frac{2v+1-\lambda}{(v+2)(v+1)}. \quad (8.8.91)$$

Polinomul din (8.8.89) are o structură matematică specifică. El a fost studiat de către Hermite (*polinoame Hermite*), putînd fi exprimat sub forma

$$H_v(\xi) = (-1)^v e^{\xi^2} \frac{d^v(e^{-\xi^2})}{d\xi^v}. \quad (8.8.92)$$

În acest caz, funcția de undă se va exprima astfel

$$\psi(\xi) = \psi_0 e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \sum_v b_v \xi^v = \psi_0 e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_v(\xi) \quad (8.8.93)$$

sau în formă normată, impunînd condiția de normare (8.5.22),

$$\psi_v(x) = \frac{1}{\sqrt{2^v v! \sqrt{\pi x_0}}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} H_v\left(\frac{x}{x_0}\right). \quad (8.8.93)$$

Desigur, o astfel de funcție de undă va trebui să satisfacă și condițiile standard (8.5.26), de exemplu să fie finită. De aceea, vom impune condiția ca polinomul $\sum_j b_j \xi^j$ din (8.8.89) să se anuleze, începînd cu termenul de ordin $j = v+2$, deci vom lua $b_{v+2} = 0$. Atunci, din formula

(8.8.91), ținând cont și de notațiile (8.8.79), se va obține

$$E_v = h \omega \left(v + \frac{1}{2} \right), \quad v = 0, 1, 2. \quad (8.8.94)$$

Acest rezultat evidențiază faptul că energia oscilatorului este cuantificată, v jucînd rol de *număr cuantic de vibrație*. Se constată de asemenea că fiecărui nivel de vibrație (fig. 8.8.17) îi corespunde o singură funcție proprie $\psi_v(x)$, adică nivelele de vibrație sînt nedegenerate ($g_v = 1$).

Este interesant de remarcat și faptul că nivelele energetice cuantificate ale unui oscilator linear armonic sînt echidistante și că acesta posedă

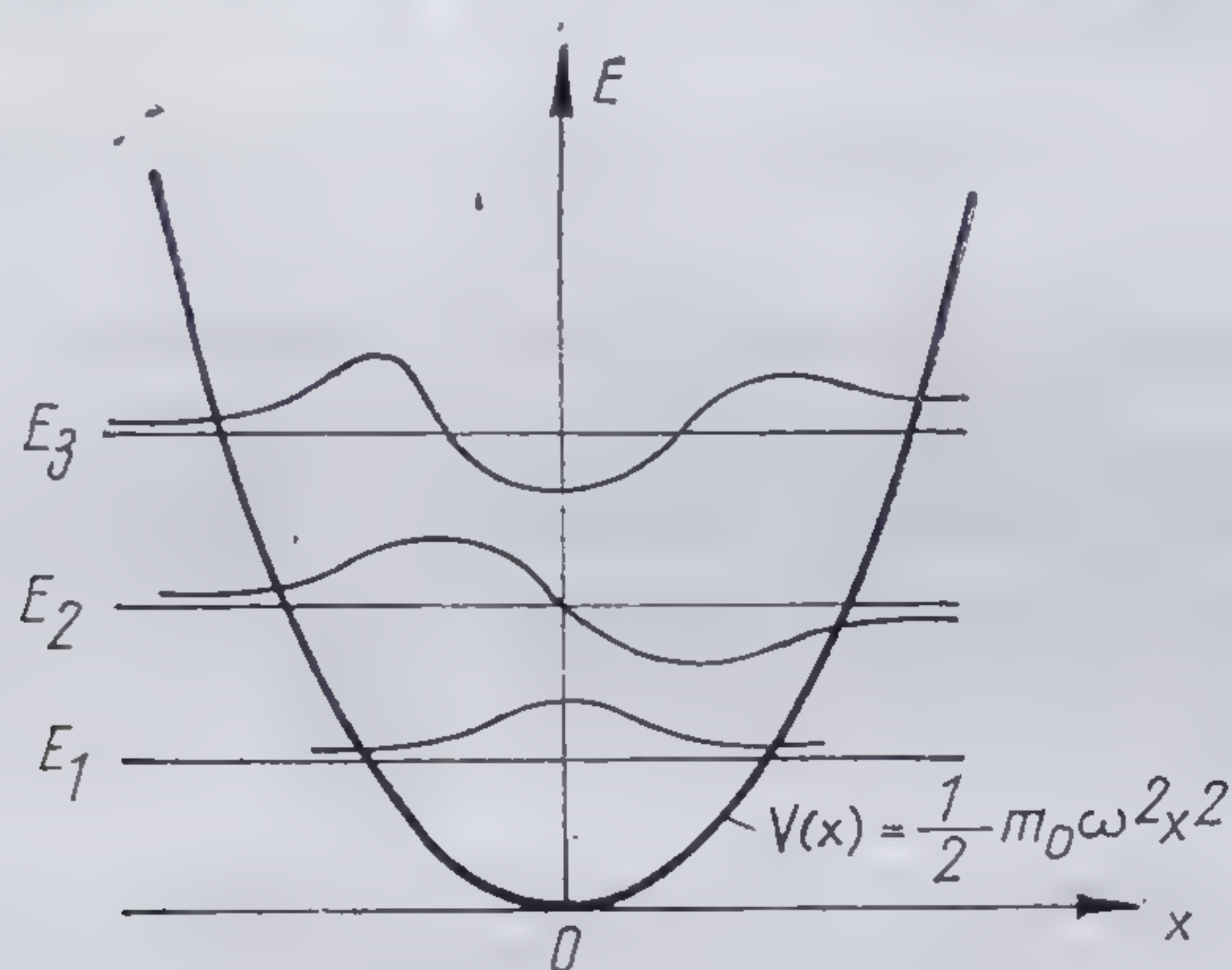


Fig. 8.8.17

o energie de nul diferită de zero. Într-adevăr, pentru $v = 0$, din (8.8.94) se obține

$$E_0 = \frac{1}{2} h \omega. \quad (8.8.95)$$

Semnificația acestei energii de nul este deosebit de interesantă (vezi și §9.5, 12.10.3). Aici vom arăta că ea poate fi pusă pe seama relațiilor de corelație (8.7.8). Astfel, dacă se ia $\langle (\hat{\Delta}x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle$ (abaterea pătratică medie egală cu valoarea pătratică medie) și $\langle (\hat{\Delta}p_x)^2 \rangle = \langle p_x^2 \rangle$, atunci din (8.7.8) rezultă

$$\langle p_x^2 \rangle = \frac{h^2}{4 \langle x^2 \rangle}$$

care, introdusă în (8.8.77), conduce la expresia

$$E = \langle H \rangle = \frac{h^2}{8m_0 \langle x^2 \rangle} + \frac{1}{2} m_0 \omega^2 \langle x^2 \rangle. \quad (8.8.96)$$

Valoarea minimă, în raport cu $\langle x^2 \rangle$ a acestei expresii, obținută din condiția

$$\left[\frac{\partial E}{\partial \langle x^2 \rangle} \right]_{\langle x_0^2 \rangle} = - \frac{h^2}{8m_0 \langle x_0^2 \rangle} + \frac{m_0 \omega^2}{2} = 0 \quad (8.8.97)$$

este tocmai energia de nul, deoarece prin calcule simple se obține

$$E_{\min} = \frac{\hbar^2}{8m_0\langle x_0^2 \rangle} + \frac{1}{2} m_0 \omega^2 \langle x_0^2 \rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega = E_0 \quad (8.8.98)$$

Trebuie, de asemenea, reținut că studiul cuantic al oscilatorului armonic a jucat un rol deosebit în teoria cuantică a câmpurilor și în electro-dinamica cuantică (vezi §12.10.4). Din acest motiv, vom prezenta în continuare succint, un alt mod de abordare a studiului oscilatorului liniar cuantic pe care îl datorăm lui P. Dirac. În acest studiu se pleacă de la ideea că întrucât în operatorul hamiltonian \hat{H} , al oscilatorului liniar cuantic:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_0} \hat{p}_x^2 + \frac{1}{2} m_0 \omega^2 \hat{x}^2 \quad (8.8.99)$$

intră numai două variabile dinamice \hat{x} și \hat{p}_x , care satisfac o relație de necomutare de forma:

$$[\hat{x}, (-i\hbar\hat{p}_x)] = 1 \quad (8.8.100)$$

în locul acestor variabile pot fi introduși alți doi operatori \hat{a} și \hat{a}^+ , cu semnificații fizice interesante, folosind o transformare de forma:

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \alpha\hat{x} + \beta(-i\hbar^{-1}\hat{p}_x) & \hat{x} &= \frac{1}{2\alpha}(\hat{a} + \hat{a}^+) \\ & & & \\ \hat{a}^+ &= \alpha\hat{x} + \beta(-i\hbar^{-1}\hat{p}_x) & \hat{p}_x &= -\frac{i\hbar}{2\beta}(\hat{a} - \hat{a}^+) \end{aligned} \quad (8.8.101)$$

Să admitem că și operatorii \hat{a} și \hat{a}^+ satisfac următoarea relație de necomutare:

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1. \quad (8.8.102)$$

Introducând în această relație expresiile lui \hat{a} și \hat{a}^+ date de (8.8.101), rezultă

$$\alpha\beta = -\frac{1}{2}. \quad (8.8.103)$$

Dacă se impune și condiția ca după înlocuirea expresiilor (8.8.101) în hamiltonianul (8.8.99), termenii pătratici (în \hat{a}^2 și $(\hat{a}^+)^2$) să se anuleze, se va obține:

$$\alpha^2 = \frac{\omega^2 m_0^2}{\hbar^2} \beta^2$$

respectiv

$$\alpha = -\frac{m_0\omega}{\hbar} \beta \quad (8.8.104)$$

Această relație, împreună cu (8.8.103), conduce la următoarele expresii pentru α și β :

$$\alpha = \left(\frac{m_0\omega}{2\hbar}\right)^{1/2}; \quad \beta = -\left(\frac{\hbar}{2m_0\omega}\right)^{1/2} \quad (8.8.105)$$

astfel încît transformările (8.8.101) iau forma :

$$\begin{aligned}\hat{a} &= \left(\frac{m_0\omega}{2\hbar}\right)^{1/2} \hat{x} + i\left(\frac{1}{2m_0\hbar\omega}\right)^{1/2} \hat{p}_x & \hat{x} &= \left(\frac{2m_0\omega}{\hbar}\right)^{-1/2} (\hat{a} + \hat{a}^+) \\ \hat{a}^+ &= \left(\frac{m_0\omega}{2\hbar}\right)^{1/2} \hat{x} - i\left(\frac{1}{2m_0\hbar\omega}\right)^{1/2} \hat{p}_x & \hat{p}_x &= -i\left(\frac{2}{m_0\hbar\omega}\right)^{1/2} (\hat{a} - \hat{a}^+)\end{aligned}\quad (8.8.106)$$

Cu aceste transformări, hamiltonianul (8.8.99) devine :

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} [\hat{a}^+ \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^+] = \hbar\omega \left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (8.8.107)$$

Se observă că într-o astfel de exprimare intră numai doi operatori necomutativi, \hat{a} și \hat{a}^+ , care se bucură de o proprietate remarcabilă și anume că, în orice reprezentare, matricea atașată produsului $\hat{a}^+ \hat{a}$ este o matrice diagonalizată. Așa, de exemplu, în reprezentarea vectorilor $\text{ket}|v\rangle$, cînd un set completă de astfel de vectori formează o bază a unei reprezentări într-un spațiu Hilbert [77], stările proprii ale lui \hat{H} vor fi date de ecuația

$$\hat{H}|v\rangle = E_v|v\rangle. \quad (8.8.108)$$

Rezultă imediat că pentru un nou vector ket, $\hat{a}|v\rangle$, cu relația de necomutare (8.8.102), vom avea :

$$\hat{H} \hat{a}|v\rangle = \hbar\omega \left(\hat{a} \hat{a}^+ + \frac{1}{2} \right) \hat{a}|v\rangle = \hbar\omega \left(\hat{a}^+ \hat{a} - \frac{1}{2} \right) \hat{a}|v\rangle \quad 8.8.109$$

respectiv :

$$\hat{H} \hat{a}|v\rangle = (E_v - \hbar\omega) \hat{a}|v\rangle \quad (8.8.110)$$

Dar întrucît

$$\hat{H}|v-1\rangle = E_v|v\rangle \quad (8.8.111)$$

vom putea scrie

$$\hat{a}|v\rangle = c|v-1\rangle \quad (8.8.112)$$

c — fiind o constantă. În mod cu totul analog se poate arăta că

$$\hat{a}^+|v\rangle = c'|v+1\rangle \quad (8.8.113)$$

Dacă se definește un operator de forma

$$\hat{N} = \hat{a}^+ \cdot \hat{a} \quad (8.8.114)$$

și se observă că $[\hat{N}, \hat{H}] = 0$, atunci vectorii $|v\rangle$ vor fi în același timp vectori proprii și pentru \hat{N} . Notînd cu v valorile proprii ale lui \hat{N} , avem

$$\hat{N}|v\rangle = v|v\rangle; \quad v = \langle v|\hat{N}|v\rangle \quad (8.8.115)$$

și deci

$$E_v = \langle v|\hat{H}|v\rangle = \hbar\omega \left(v + \frac{1}{2} \right), \quad v = 0, 1, 2, \dots \quad (8.8.116)$$

rezultat identic cu (8.8.94).

Semnificația fizică a noilor variabile cuantice \hat{a} , \hat{a}^+ și \hat{N} rezultă imediat, dacă se observă că pe baza expresiilor (8.8.112) și (8.8.113) se poate scrie

$$\hat{a}^+ \hat{a} |\nu\rangle = \hat{a}^+ c |\nu\rangle = c^2 |\nu\rangle \quad (8.8.117)$$

respectiv cu (8.8.115)

$$\langle \nu | \hat{a}^+ \hat{a} | \nu \rangle = c^2 \langle \nu | \nu \rangle = \nu \langle \nu | \nu \rangle \Rightarrow c = \sqrt{\nu}$$

În mod analog se poate arăta că $c' = \sqrt{\nu + 1}$, astfel încât se obțin ecuațiile

$$\hat{a} |\nu\rangle = \sqrt{\nu} |\nu - 1\rangle; \quad \hat{a}^+ |\nu\rangle = \sqrt{\nu + 1} |\nu + 1\rangle \quad (8.8.118)$$

cu condiția

$$\hat{a}^+ |0\rangle = 0. \quad (8.8.119)$$

Prin urmare, acțiunea operatorului \hat{a} asupra unei stări cuantice descrise prin vectorul $|\nu\rangle$ exprimă o tranziție a oscilatorului din această stare $|\nu\rangle$ într-o altă stare $|\nu - 1\rangle$, în care energia se micșorează cu $\hbar\omega$, iar acțiunea operatorului \hat{a}^+ exprimă o tranziție în sens invers, din starea $|\nu\rangle$ în starea $|\nu + 1\rangle$, prin absorbția cuantei $\hbar\omega$. Pe baza unei astfel de interpretări, Dirac extinde descrierea de mai sus la sisteme formate din ansambluri de vibratori cuantici. Într-o astfel de descriere, starea $|0\rangle$, numită *stare vidă*, nu va conține nici un astfel de vibrator, în timp ce starea $|\nu\rangle$ va conține vibratori identici, fiecare având energia $\hbar\omega$. Atunci, potrivit relației (8.8.115), operatorul \hat{N} va primi semnificația de *operator al numărului de populare* a stării $|\nu\rangle$, iar operatorii \hat{a}^+ și \hat{a} , care măresc, respectiv micșorează populația unei stări se vor numi *operator de generare*, respectiv *operator de anihilare*.

8.8.7. ROTATORUL CUANTIC

Prin rotator se înțelege un corp rigid aflat în mișcare de rotație în jurul unei axe proprii. De notat că la nivel microscopic, toate microparticulele (moleculele, atomii, nucleele, electronii etc.) sînt astfel de rotatori cuantici. Ne propunem să stabilim valorile proprii și funcțiile proprii ale variabilelor dinamice cuantice care descriu stările staționare ale unor astfel de rotatori.

1. Rotatorul cuantic cu axă fixă. Vom lua în considerație mai întâi un rotator liber ($V(r) = 0$), de moment de inerție I , cu axă fixă (fie Oz această axă, fig. 8.8.18), pentru care

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}(r) = \frac{\hat{L}_z^2}{2I}. \quad (8.8.120)$$

Dar potrivit relațiilor (8.5.17), în care se folosesc coordonate polare plane ($x = r \cos \varphi$; $y = r \sin \varphi$), avem

$$\hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (8.8.121)$$

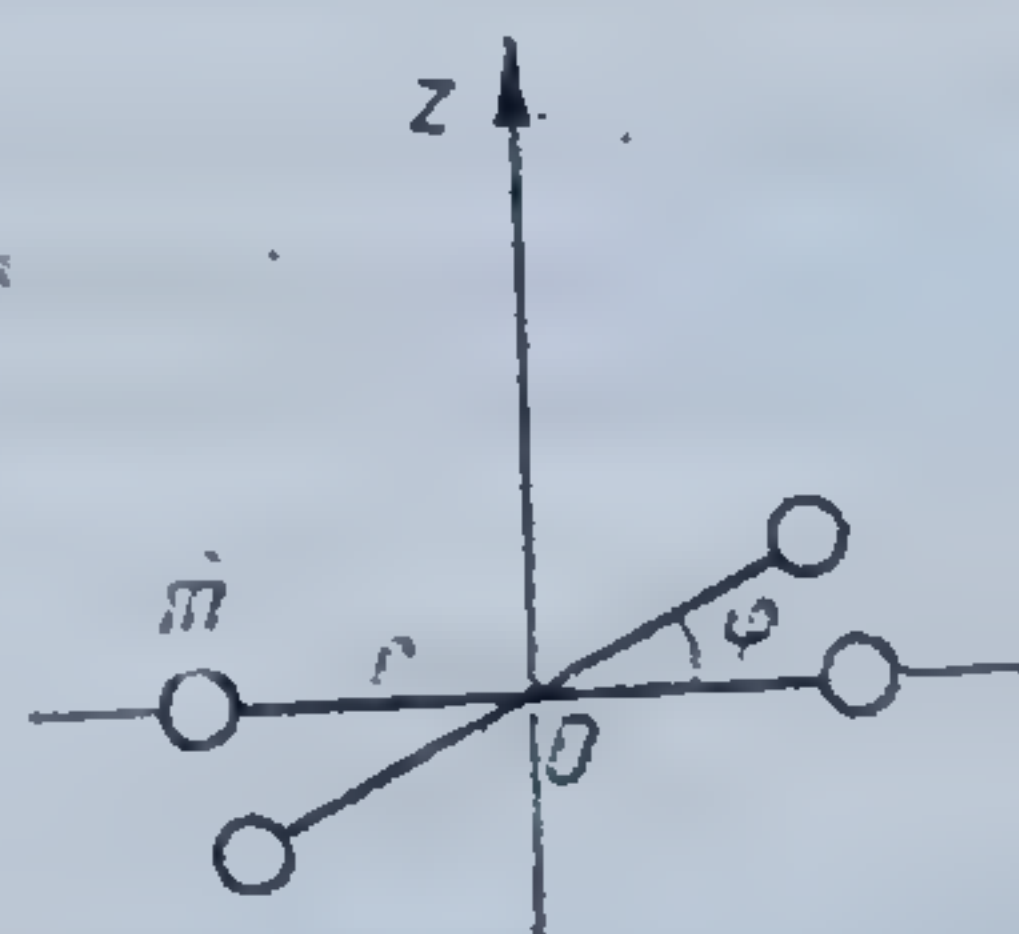


Fig. 8.8.18

astfel încît ecuația de undă, cu (8.8.120), va lua forma

$$\frac{d^2\psi(\varphi)}{d\varphi^2} + k^2 \psi(\varphi) = 0. \quad (8.8.122)$$

Și aici s-a folosit notația

$$k^2 = \frac{2I E}{\hbar^2}. \quad (8.8.123)$$

Soluția ecuației (8.8.122) este o funcție periodică de φ (cu perioada 2π), de forma

$$\psi(\varphi) = \psi_0 e^{ik\varphi} \quad (8.8.124)$$

Din condiția de periodicitate $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$ rezultă

$$2\pi k_r = 2\pi r, \quad r = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (8.8.125)$$

și deci

$$E_r = \frac{\hbar^2 r^2}{2I} \quad (8.8.126)$$

Prin urmare, energia rotatorului este cuantificată, r jucînd aici rol de *număr cuantic de rotație*.

De remarcă că „ r ” cuantifică în același timp și valorile proprii ale variabilei \hat{L}_z , întrucît ecuația

$$\hat{L}_z \psi(\varphi) = \langle L_z \rangle \psi(\varphi) \quad (8.8.127)$$

are valori proprii date de expresia

$$\langle L_z \rangle_r = \hbar r; \quad r = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (8.8.128)$$

Atașînd unui astfel de moment cinetic, un moment magnetic $\langle \mu_z \rangle$, în conformitate cu relația (6.8.43), vom constata că valorile proprii $\langle \mu_z \rangle_m$ ale acestui moment sînt date de o expresie de forma

$$\langle \mu_z \rangle_m = \frac{q}{2m_0} \langle L_z \rangle = \frac{q\hbar}{2m_0} m; \quad m = 0, \pm 1, \dots \quad (8.8.129)$$

Desigur că numerele cuantice $m = 0, \pm 1, \dots$ vor cuantifica în același timp și energia potențială W_B a momentului magnetic μ într-un cîmp de inducție magnetică B , întrucît din (6.8.40) rezultă :

$$\langle W_B \rangle = - \langle \mu_z \rangle_m B = - \frac{q\hbar B}{2m_0} m; \quad m = 0, \pm 1, \dots \quad (8.8.130)$$

Din această pricină m a primit numele de *număr cuantic magnetic*. Valorile lui m pot fi stabilite prin experimente de tip Stern-Gerlach (vezi §8.11).

2. Rotatorul cuantice cu axă liberă. În cazul rotatorului cu axă liberă (fig. 8.8.19), prin utilizarea coordonatelor polare (r, θ, φ) , se obține

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I} = -\frac{\hbar^2}{2I} \Delta_{\theta\varphi} \quad (8.8.131)$$

în care $\Delta_{\theta\varphi}$ este componenta sferică a laplaceanului, iar prin

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta\varphi} = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (8.8.132)$$

s-a notat expresia în coordonate sferice a operatorului „moment cinetic la pătrat“.

Ecuatia de valori proprii pentru \hat{L}^2 va fi atunci de forma

$$\hat{L}^2 Y(\theta, \varphi) = \langle L^2 \rangle Y(\theta, \varphi). \quad (8.8.133)$$

Dar pentru un rotator cu axă liberă este valabilă egalitatea

$$\langle L^2 \rangle = \langle L_x^2 \rangle + \langle L_y^2 \rangle + \langle L_z^2 \rangle = 3 \langle L_z^2 \rangle. \quad (8.8.134)$$

Dacă, potrivit relației (8.8.128), se va lua $r = m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l$, atunci

$$\langle L_z^2 \rangle_{m_l} = \hbar^2 \frac{l^2 + (l-1)^2 + \dots + (-l)^2}{2l+1} = \frac{\hbar^2}{3} l(l+1) \quad (8.8.135)$$

și deci

$$\langle L^2 \rangle = \hbar^2 l(l+1). \quad (8.8.136)$$

Desigur că în acest caz și energia rotatorului este cuantificată fiind dată de expresia

$$\langle E_r \rangle = \frac{\hbar^2}{2I} r(r+1); \quad r = 0, 1, \dots \quad (8.8.137)$$

De notat că fiecare nivel energetic este degenerat de g_r ori, unde

$$g_r = 2r + 1. \quad (8.8.138)$$

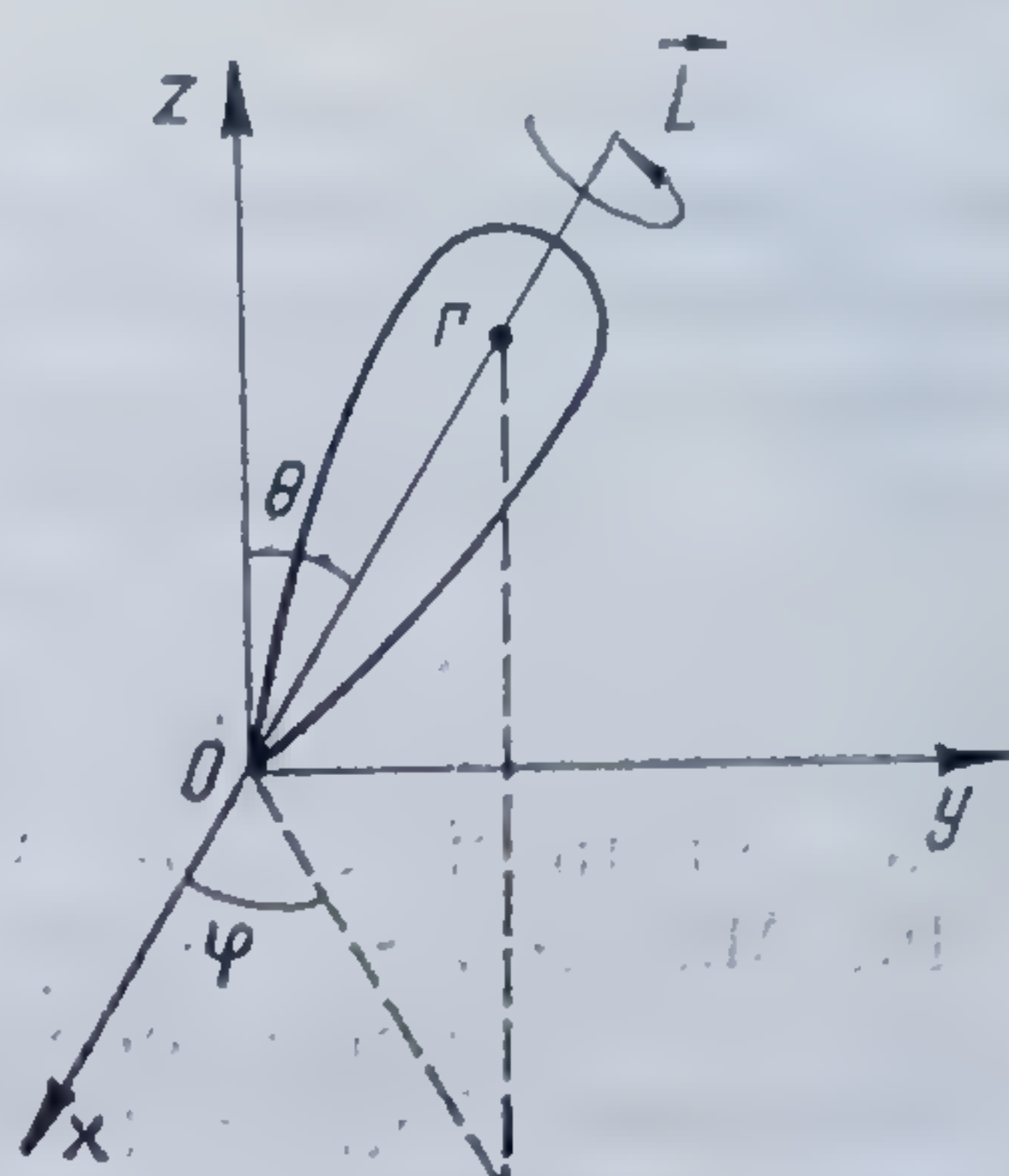


Fig. 8.8.19

§ 8.9. CUANTIFICAREA UNUI CÎMP ELECTROMAGNETIC

Problema cuantificării unui câmp electromagnetic l-a preocupat în mod deosebit pe Dirac. El era convins că dacă mecanica cuantică și-a constituit limbajul plecînd de la existența cuantelor de lumină, atunci trebuie să existe și o cale inversă, care să permită regăsirea respectivelor cuante plecînd de la cuantificarea câmpului electromagnetic. Dirac [28] a reușit, în anul 1927, să dea o interesantă rezolvare acestei probleme, bazată pe teoria cuantică a oscilatorului armonic (expusă în paragraful precedent). În această teorie cuantică câmpul electromagnetic este echivalat cu un sistem de vibratori cuantici. Dealtfel, încă din teoria clasică a lui Maxwell s-a constatat (§6.10.1) că există o astfel de echivalență, mai ales sub aspect energetic. Pentru un câmp electromagnetic aflat în condiții de echilibru termodinamic, într-o incintă închisă cu pereți reflectători, echivalența se va face cu un sistem de oscilatori armonici, aflați în aceleași condiții de echilibru ca și câmpul. Fiecărui oscilator îi va corespunde o anumită undă electromagnetică monocromatică, de pulsație ω_k și vector de undă k bine precizate.

Așa cum s-a văzut în §6.2, câmpul electromagnetic poate fi descris printr-un potențial vector $A(x, y, z)$ (pentru simplitate se va presupune că potențialul scalar este nul), care pe fețele incintei, presupusă de formă cubică și de muchie L , satisface condiții la limită de forma

$$A(x, y, z) = A(x + L, y, z) = A(x, y + L, z) = A(x, y, z + L) \quad (8.9.1)$$

Descompunînd funcția $A(r, t)$ în componente Fourier plano

$$A(r, t) = \sum_k A_k(r) e^{i\omega_k t} \quad (8.9.2)$$

vom putea lua pentru fiecare din aceste componente cîte o expresie de forma

$$A_k(r, t) = A_k(t) e^{ikr} + A_k^*(t) e^{-ikr} \quad (8.9.3)$$

în care

$$A_k(t) = A_k e^{i\omega_k t}; \quad A_k^*(t) = A_k^* e^{-i\omega_k t} \quad (8.9.4)$$

Atunci, din condițiile (8.9.1) vor rezulta egalități de forma

$$\begin{aligned} A_k e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} &\equiv A_k e^{i(k_x (x+L) + k_y y + k_z z)} \equiv A_k e^{i(k_x x + k_y (y+L) + k_z z)} \equiv \\ &\equiv A_k e^{i(k_x x + k_y y + k_z (z+L))} \end{aligned}$$

respectiv

$$e^{ik_x L} \equiv e^{ik_y L} \equiv e^{ik_z L} \equiv 1$$

ceea ce înseamnă că vectorul de undă k va fi determinat de un set de numere întregi (n_1, n_2, n_3) (acestea pot fi privite ca grade de libertate ale sistemului) printr-o expresie de forma

$$k = \frac{2\pi}{L} (n_1 \mathbf{i} + n_2 \mathbf{j} + n_3 \mathbf{k}); \quad n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (8.9.5)$$

Vor exista desigur două stări de polarizare pentru aceste unde transversale (vezi §6.11), pe care le vom marca printr-un indice p , astfel încât în locul expresiei (8.9.2), vom scrie

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} [\mathbf{A}_{\mathbf{k}}^p(t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^{p*}(t) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}]. \quad (8.9.6)$$

În cele două plane de vibrație, perpendiculare pe direcția de propagare \mathbf{k} , se pot defini versorii celor două stări de vibrație $\mathbf{e}_k^{p_1}$ și $\mathbf{e}_k^{p_2}$ în așa fel încât $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_k^{p_1}) = (\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_k^{p_2})$. Atunci, pentru vectorii câmp electric \mathbf{E} și câmp magnetic \mathbf{H} , pe baza relațiilor cunoscute din electrodinamica clasică

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}; \quad \mathbf{H} = \frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{A}$$

se obțin expresiile

$$\mathbf{E} = -\sum_{\mathbf{k}p} \omega_{\mathbf{k}} (\mathbf{A}_{\mathbf{k}}^p e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^{p*} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}); \quad \mathbf{H} = \frac{i}{\mu_0} \sum_{\mathbf{k}p} [(\mathbf{k} \times \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^p) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - (\mathbf{k} \times \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^{p*}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}] \quad (8.9.7)$$

În același mod, pentru densitatea de energie w_{EB} a câmpului electromagnetic (vezi 6.3.16) se va obține expresia

$$w_{EB} = \frac{1}{2} (\varepsilon_0 \mathbf{E}^2 + \mu_0 \mathbf{H}^2) = -\sum_{\mathbf{k}p} \sum_{\mathbf{k}'p'} \{ \varepsilon_0 \omega_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}'} (\mathbf{A}_{\mathbf{k}}^p e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^{p*} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}) (\mathbf{A}_{\mathbf{k}'}^{p'} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} - \mathbf{A}_{\mathbf{k}'}^{p'*} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}}) + \frac{1}{\mu_0} [(\mathbf{k} \times \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^p) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - (\mathbf{k} \times \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^{p*}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}] \cdot [(\mathbf{k}' \times \mathbf{A}_{\mathbf{k}'}^{p'}) e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} - (\mathbf{k}' \times \mathbf{A}_{\mathbf{k}'}^{p'*}) e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}}] \}.$$

Prin integrarea acestei expresii pe întregul volum $\mathcal{V} = L^3$ al cutiei, se va obține

$$W_{EB} = 2\varepsilon_0 \mathcal{V} \sum_{\mathbf{k}p} \omega_{\mathbf{k}}^2 \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^p \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^{p*} \quad (8.9.8)$$

întrucât

$$\int e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} d\mathcal{V} = \begin{cases} L^3 & \text{pentru } \mathbf{k}' = -\mathbf{k} \\ 0 & \text{pentru } \mathbf{k}' \neq -\mathbf{k} \end{cases} \quad (8.9.9)$$

și

$$(\mathbf{k} \times \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^p)(\mathbf{k} \times \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^{p*}) = k^2 \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^p \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^{p*}. \quad (8.9.10)$$

De remarcat că o expresie de forma (8.9.8) poate fi adusă, cu următoarele transformări canonice

$$\mathbf{A}_{\mathbf{k}}^p = \frac{1}{2} \left(\frac{m}{\varepsilon_0 \mathcal{V}} \right)^{1/2} \left(x_{\mathbf{k}} + \frac{ip_{x_{\mathbf{k}}}}{\omega_{\mathbf{k}} m} \right) \mathbf{e}_k^{p_1}; \quad \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^{p*} = \frac{1}{2} \left(\frac{m}{\varepsilon_0 \mathcal{V}} \right)^{1/2} \left(x_{\mathbf{k}} - \frac{ip_{x_{\mathbf{k}}}}{\omega_{\mathbf{k}} m} \right) \mathbf{e}_k^{p_2}, \quad (8.9.11)$$

la forma

$$W_{BB} = \sum_k \left(m \omega_k^2 x_k^2 + \frac{1}{2m} p_{x_k}^2 \right) \quad (8.9.12)$$

și se observă că o astfel de expresie reprezintă tocmai energia unui sistem de oscilatori liniari armonici.

Din cele de mai sus rezultă că în tratarea cuantică a unui câmp electromagnetic va trebui să înlocuim mărimile Λ_k^p și Λ_k^{p*} prin operatori cuantici corespunzători, ale căror expresii pot fi obținute din (8.9.11), cu transformări de forma (8.8.101). Se vor obține expresii de forma

$$\hat{A}_k^p = \frac{1}{2} \left(\frac{m}{\varepsilon_0 \mathcal{V}} \right)^{1/2} \left(\hat{x} + \frac{i}{m \omega} \hat{p}_x \right) = \left(\frac{\hbar}{2 \varepsilon_0 \omega_k \mathcal{V}} \right)^{1/2} \hat{a}_k \quad (8.9.13)$$

$$\hat{A}_k^{*p} = \frac{1}{2} \left(\frac{m}{\varepsilon_0 \mathcal{V}} \right)^{1/2} \left(\hat{x} - \frac{i}{m \omega} \hat{p}_x \right) = \left(\frac{\hbar}{2 \varepsilon_0 \omega_k \mathcal{V}} \right)^{1/2} \hat{a}_k^+$$

Pentru operatorul hamiltonian \hat{H} , în conformitate cu (8.9.8), se va obține expresia

$$\hat{H} = \varepsilon_0 \mathcal{V} \sum_k \omega_k^2 (\hat{A}_k^p \hat{A}_k^{p*} + \hat{A}_k^{p*} \hat{A}_k^p) \quad (8.9.14)$$

care, cu (8.9.13), se va reduce la forma

$$\hat{H} = \sum_k \hbar \omega_k \left(\hat{a}_k \hat{a}_k^+ + \frac{1}{2} \right) \quad (8.9.15)$$

Se ajunge astfel la concluzia că energia cuantificată a unui câmp electromagnetic este dată de o expresie similară celei obținute pentru un sistem de oscilatori cuantici liniari armonici și anume :

$$E = \sum_k \hbar \omega_k \left(N_k^p + \frac{1}{2} \right) \quad (8.9.16)$$

Desigur că aici N_k^p va exprima numărul de fotoni din starea k , cu polarizarea p , fiecare foton avînd energia $\varepsilon_k = \hbar \omega_k$, în concordanță cu ipoteza lui Planck.

Trebuie observat că rezultatul (8.9.16) pune în evidență existența, și pentru câmpul electromagnetic, a unei *energii de nul*, dată de expresia

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_k \hbar \omega_k \quad (8.9.17)$$

Valoarea acestei energii de nul este însă infinit de mare, deoarece unui câmp electromagnetic trebuie să i se asocieze, în general, un număr infinit de mare de grade de libertate (deci $k \in [1, \infty)$). Un astfel de rezultat

nu este însă la fel de supărător ca cel obținut de Rayleigh și Jeans (§8.1), deoarece energia de nul nu intervine niciodată în mod direct în procesele de schimb energetic dintre câmp și substanță, schimb ce se realizează prin intermediul cuantelor de energie (respectiv al fotonilor). Energia de nul poate însă să afecteze stările energetice ale unor microparticule, aflate în câmpurile electrice create de alte particule (stări legate), cum este cazul electronului atomic. Calculele conduc la o schimbare de numai $4 \cdot 10^{-6}$ eV pentru atomul de H, aflat în starea fundamentală, datorită energiei de nul, dar această schimbare s-a dovedit a fi într-o excelentă concordanță cu datele experimentale de radiospectroscopie (vezi § 12.10.3).

§ 8.10. METODE APROXIMATIVE DE REZOLVARE A ECUAȚIEI LUI SCHRÖDINGER

În paragraful precedent au fost prezentate câteva probleme simple de mecanică cuantică, în care rezolvarea ecuațiilor lui Schrödinger nu comportă dificultăți matematice prea mari. Dar nu toate cazurile de interes teoretic sau practic oferă o astfel de situație, dificultățile matematice care intervin fiind legate îndeosebi de prezența în aceste ecuații a energiei potențiale $V(r)$. De aceea, au fost imaginate și create câteva metode aproximative de rezolvare a ecuațiilor lui Schrödinger, două dintre aceste metode fiind prezentate succint în cadrul acestui paragraf (vezi și §§10.7; 11.2).

a) *Metoda WKB*. Această metodă a fost inițiată în anul 1926, independent de către G. Wentzel, U. A. Kramers și L. Brillouin, și se bazează pe ideea că la limita $\hbar \rightarrow 0$ legile mecanicii cuantice trebuie să se reducă la legile mecanicii clasice, cerință impusă de *principiul de corespondență*. În §8.6 s-a văzut că unei astfel de cerințe îi corespund și legile de evoluție ale valorilor medii ale variabilelor dinamice din mecanica cuantică. Problema poate fi însă formulată și într-un astfel de mod încât să fie satisfăcută cerința de mai sus și anume plecând de la legile cuantice, la limita $\hbar \rightarrow 0$, să se regăsească legile clasice. În acest scop este convenabil să exprimăm funcția de undă ψ prin intermediul acțiunii mecanice S . În conformitate cu relațiile (8.4.3) și (1.6.23) se obține

$$\psi(r, t) = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar} S}. \quad (8.10.1)$$

Introducând în ecuația atemporală Schrödinger (8.6.9) această funcție rezultă ecuația

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{1}{2m_0} (\nabla S)^2 + \frac{i\hbar}{2m_0} \Delta S - V(r). \quad (8.10.2)$$

Aşa cum se vede, ecuaţia (8.10.2) trece automat la forma ecuaţiei clasice (1.6.20), dacă se face $\hbar \rightarrow 0$. Desigur că, în acest caz şi lungimea de undă $\lambda = \frac{\hbar}{p}$ va tinde spre zero ($\lambda \rightarrow 0$), astfel încât metoda WKB va fi vala-

bilă pentru descrierea numai a acelor procese în care lungimea de undă asociată microparticulelor este neglijabil de mică în raport cu dimensiunile spaţiale ale domeniului luat în studiu.

Metoda WKB se bazează pe dezvoltarea în serie, după puterile lui \hbar , a funcţiei de undă (8.10.1) şi pe neglijarea termenilor de grad superior lui \hbar^2 . Se obţin, în acest fel, ecuaţii pentru $\psi(r, t)$ care pot fi rezolvate mult mai uşor decât ecuaţiile lui Schrödinger. Aşa, de exemplu, dacă se dezvoltă funcţia S într-o serie de puteri de forma

$$S = S_0 + \left(\frac{\hbar}{i}\right) S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2 + \dots \quad (8.10.3)$$

atunci, din ecuaţia temporală (8.10.2), în aproximaţia de ordinul zero, va rezulta ecuaţia clasică de mişcare

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} = -\frac{1}{2m_0} (\Delta S_0)^2 - V(r) \quad (8.10.4)$$

iar în aproximaţia de ordinul întâi ($\hbar^2 \rightarrow 0$), ecuaţia

$$\frac{\partial S_1}{\partial t} = -\frac{1}{m_0} \nabla S_0 \nabla S_1 - \frac{1}{2m_0} \Delta S_0. \quad (8.10.5)$$

Pentru stări staţionare, această ultimă ecuaţie se reduce la forma

$$\nabla S_1 \nabla S_0 + \frac{1}{2} \Delta S_0 = 0 \quad (8.10.6)$$

respectiv pentru o mişcare unidimensională, la forma

$$\frac{dS_1}{dx} = -\frac{1}{2} \frac{d^2 S_0}{dx^2} : \frac{dS_0}{dx}. \quad (8.10.7)$$

Dar se ştie (vezi (1.6.22)) că dS_0/dx reprezintă tocmai impulsul microparticulei, deoarece $\frac{dS_0}{dx} = \pm \sqrt{2m_0(E - V(x))} = p(x)$. Atunci, prin integrarea ecuaţiei (8.10.7) obţinem

$$S_1 = -\frac{1}{2} \ln p_x + \ln C = \ln \frac{C}{\sqrt{p_x}}. \quad (8.10.8)$$

Înlocuind acest rezultat în (8.10.3), va rezulta pentru funcția de undă ψ , în aproximația de ordinul întâi în \hbar , expresia

$$\psi(x) = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(S_0 + S_1)} = \frac{\psi_0}{\sqrt{p_x}} e^{\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx} \quad (8.10.9)$$

sau luînd în considerație ambele semne posibile ale lui p_x

$$\psi(x) = \frac{\psi_{01}}{\sqrt{p_x}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^x |p_x| dx} + \frac{\psi_{02}}{\sqrt{p_x}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^x |p_x| dx} \quad (8.10.10)$$

Constantele ψ_{01} , ψ_{02} și a din această expresie se pot determina din condiții la limită. De exemplu, în cazul unei gropi de potențial, pentru care $V(x) > E$, impulsul $p(x)$ va fi o mărime imaginară

$$p(x) = \pm i[2m_0(V(x) - E)]^{1/2} = \pm i |p(x)| \quad (8.10.11)$$

și deci funcția de undă $\psi(x)$ va fi finită numai dacă $\psi_{02} = 0$.

Prin urmare

$$\psi(x) = \frac{\psi_{01}}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^x |p(x)| dx} \quad (8.10.12)$$

Constanta ψ_{01} se poate determina plecînd de la constatarea că în apropiere de punctul $x = a$, cu $V(x) = E$, avem aproximativ (fig. 8.10.1)

$$V(x) = V(a) + \left(\frac{\partial V}{\partial x} \right)_a (x - a) + \dots = E + \left(\frac{\partial V}{\partial x} \right)_a (x - a) + \dots \quad (8.10.13)$$

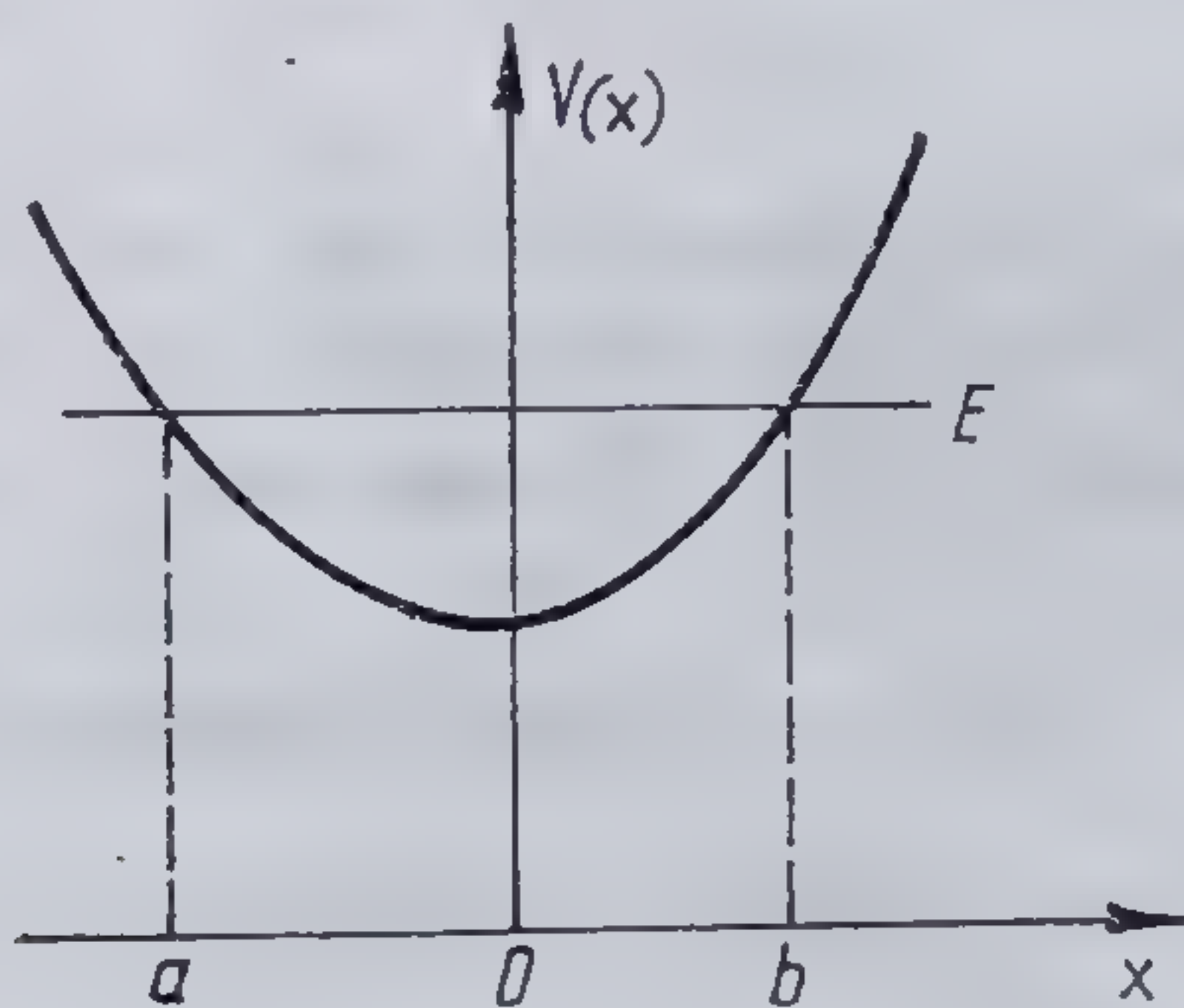


Fig. 8.10.1

Atunci, pentru $x < b$, se va obține funcția

$$\psi(x) = \frac{\psi_0}{\sqrt{p}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^b p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right) \quad (8.10.14)$$

Întrucît $\psi(a) = \psi(b) = 0$, respectiv $\sin\left(\frac{1}{h}\int_a^b p_x dx - \frac{\pi}{2}\right) = 0$, condiție satisfăcută numai de următorul șir discret de valori

$$\frac{1}{h}\int_a^b p_x dx - \frac{\pi}{2} = n\pi; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (8.10.14)$$

rezultă

$$\int_a^b p_x dx = \pi h \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (8.10.15)$$

Se observă că pentru mișcări pe orbite închise, cînd $\int_a^b p_x dx = \frac{1}{2} \oint p_x dx$, se obține, în aproximația $n \gg 1$, condiția de cuantificare a lui Bohr (8.3.37)

$$\oint p_x dx = 2\pi h \left(n + \frac{1}{2}\right) \simeq nh. \quad (8.10.16)$$

b) *Metoda (teoria) perturbațiilor*. Este o altă metodă aproximativă de a obține soluții pentru ecuațiile lui Schrödinger. Această metodă poate fi folosită atît pentru cazul stărilor nedegenerate, cît și pentru a celor degenerate, staționare sau nestaționare, cu condiția ca operatorul hamiltonian \hat{H} să poate fi descompus sub forma

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' \quad (8.10.17)$$

\hat{H}_0 fiind un operator hamiltonian simplu, pentru care se cunosc funcțiile de undă proprii $\psi_n^{(0)}$, iar \hat{H}' , care exprimă o perturbație, să fie de valoare mică în comparație cu \hat{H}_0 . Atunci, pentru o stare staționară nedegenerată, în care caz

$$(\hat{H}_0 + \hat{H}')\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (8.10.18)$$

$$\hat{H}_0\psi_k^{(0)}(\mathbf{r}) = E_k^{(0)}\psi_k^{(0)}(\mathbf{r}) \quad (8.10.19)$$

vom putea lua pe $\psi(\mathbf{r})$ de forma

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_k C_k \psi_k^{(0)} \quad (8.10.20)$$

ceea ce se vede că este echivalent cu a trece la o reprezentare energetică. Prin înlocuirea acestei funcții în ecuația (8.10.18), înmulțirea la stînga a

expresiei obținute cu $\psi_m^{(0)*}(\mathbf{r})$ și integrarea ei, rezultă

$$\sum_k C_k \int \psi_m^{(0)*} \hat{H}_0 \psi_k^{(0)} d\mathcal{V} + \sum_k C_k \int \psi_m^{(0)*} \hat{H}' \psi_k^{(0)} d\mathcal{V} = E \sum_k C_k \int \psi_m^{(0)*} \psi_k^{(0)} d\mathcal{V}. \quad (8.10.21)$$

Dacă se ține aici cont de condiția de ortonormare (8.5.23), se va obține următorul sistem de ecuații

$$C_m(E - E_k^{(0)}) = \sum_k H'_{mk} C_k; \quad m = 1, 2, \dots \quad (8.10.22)$$

în care prin

$$H'_{mk} = \int \psi_m^{(0)*} \hat{H}' \psi_k^{(0)} d\mathcal{V} \quad (8.10.23)$$

s-a notat *matricea reprezentativă* a operatorului de perturbație \hat{H}' .

Se observă că aflarea energiei E a sistemului cuantic presupune cunoașterea soluțiilor sistemului de ecuații liniare (8.10.22). Aceste soluții pot fi obținute prin aproximații succesive, luând pentru E și C_m dezvoltări în serie, cu termeni descrescători de forma

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + \dots; \quad C_m = C_m^{(0)} + C_m^{(1)} + C_m^{(2)} + \dots \quad (8.10.24)$$

Atunci, desigur că pentru al n -lea nivel energetic, în aproximația de ordinul zero

$$\psi = \sum_k C_k^{(0)} \psi_k^{(0)} = \psi_n^{(0)}, \quad C_k^{(0)} = \delta_{kn} = \begin{cases} 1, & n = k \\ 0, & n \neq k. \end{cases} \quad (8.10.25)$$

Pentru a găsi pe ψ , în aproximația de ordinul întâi, este necesar să luăm în considerație numai primii doi termeni din seriile (8.10.24), cu care sistemul (8.10.22) primește forma

$$(\delta_{mn} + C_m^{(1)})(E_n^{(0)} + E_n^{(1)} - E_m^{(0)}) = \sum_k H'_{mk}(\delta_{nk} + C_k^{(1)}) \quad (8.10.26)$$

Prin neglijarea, în continuare, a termenilor mici de ordinul doi, $C_m^{(1)} \cdot E_n^{(1)} \simeq 0$, se găsește:

$$C_m^{(1)}(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) + \delta_{mn} E_n^{(1)} = \sum_k H'_{mk} \delta_{kn} = H'_{mn}. \quad (8.10.27)$$

Din această egalitate rezultă

$$E_n^{(1)} = H'_{nn}, \quad C_n^{(1)} = \frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \quad (8.10.28)$$

Prin urmare, energia și funcția de undă, în aproximația de ordinul întâi, vor fi date de expresiile

$$E = E_n^{(0)} + H'_{nn}; \quad \psi = \psi_n^{(0)} + \sum_{k \neq n} \frac{H'_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \psi_k^{(0)}. \quad (8.10.29)$$

Se observă că o astfel de aproximație este satisfăcătoare numai dacă perturbația este mică, adică $H'_{kn} \ll |E_n^{(0)} - E_k^{(0)}|$.

Prin calcule analoge, în aproximația de ordinul al doilea, pentru energie se obține expresia

$$E = E_n^{(0)} + H'_{nn} + \sum_{k \neq n} \frac{|H'_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}. \quad (8.10.30)$$

Problema desigur se complică pentru cazul *stărilor degenerate*, în care unui nivel energetic neperturbat $E_n^{(0)}$ îi corespund mai multe funcții de undă $\psi_l^{(0)}$. De exemplu, în cazul unei stări dublu degenerate, pentru care

$$\hat{H} \psi_1^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_1^{(0)} \text{ și } \hat{H} \psi_2^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_2^{(0)} \quad (8.10.31)$$

în aproximația de ordinul zero se va obține

$$E = E^{(0)}; \psi = C_1^{(0)} \psi_1^{(0)} + C_2^{(0)} \psi_2^{(0)} \quad (8.10.32)$$

În aproximația de ordinul întâi, cu

$$E = E^{(0)} + E^{(1)}, \quad (8.10.33)$$

ecuația Schrödinger (8.10.18) se va scrie sub forma

$$(\hat{H}_0 + \hat{H}') (C_1^{(0)} \psi_1^{(0)} + C_2^{(0)} \psi_2^{(0)}) = (E^{(0)} + E^{(1)}) (C_1^{(0)} \psi_1^{(0)} + C_2^{(0)} \psi_2^{(0)}),$$

sau după simplificări

$$\hat{H}' (C_1^{(0)} \psi_1^{(0)} + C_2^{(0)} \psi_2^{(0)}) = E^{(1)} (C_1^{(0)} \psi_1^{(0)} + C_2^{(0)} \psi_2^{(0)}). \quad (8.10.34)$$

Dacă se înmulțește această expresie la stînga cu $\psi_1^{(0)*}$, apoi se integrează și se ține seama de ortonormalitatea funcțiilor de undă, se obține ecuația

$$C_1^{(0)} H'_{11} + C_2^{(0)} H'_{12} = C_1^{(0)} E^{(1)} \quad (8.10.35)$$

O ecuație analogă se va obține prin înmulțirea la stînga a expresiei (8.10.34) cu $\psi_2^{(0)*}$ și anume

$$C_1^{(0)} H'_{21} + C_2^{(0)} H'_{22} = C_2^{(0)} E^{(1)}. \quad (8.10.36)$$

Mai sus, prin H'_{nm} au fost notat elementele de forma (8.10.23) ale matricei pătrate

$$H'_{nm} = \begin{vmatrix} H'_{11} & H'_{12} \\ H'_{21} & H'_{22} \end{vmatrix}. \quad (8.10.37)$$

Desigur că sistemul format din ecuațiile

$$C_1^{(0)} (H'_{11} - E^{(1)}) + C_2^{(0)} H'_{12} = 0; \quad C_1^{(0)} H'_{21} + C_2^{(0)} (H'_{22} - E^{(1)}) = 0 \quad (8.10.38)$$

va avea soluții netriviiale numai dacă determinantul său principal va fi nul, adică numai dacă

$$\begin{vmatrix} H'_{11} - E^{(1)} & H'_{12} \\ H'_{21} & H'_{22} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0. \quad (8.10.39)$$

Din această egalitate rezultă, printr-un calcul simplu,

$$E_{12}^{(1)} = \frac{1}{2} [(H'_{11} + H'_{22}) \pm \sqrt{(H'_{11} - H'_{22})^2 + 4(H'_{12})^2}]. \quad (8.10.40)$$

Faptul că în prezența perturbației se obțin două valori distincte pentru energia sistemului înseamnă că *perturbația determină o ridicare a degenerării*. Rezultate analoge se obțin și în cazul stărilor multiplu degenerate, dar prin calcule mult mai laborioase.

Pentru cazul *stărilor nestaționare* va trebui să luăm, în locul ecuației (8.10.18), o ecuație Schrödinger temporală de forma

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{H}') \psi \quad (8.10.41)$$

și funcții de undă dependente de timp, de forma (8.6.3), metoda aproximațiilor succesive pe care o folosește teoria perturbațiilor în cazul stărilor nestaționare fiind întru totul analogă celei schițate pentru stări staționare. Astfel, dacă starea este nedegenerată, atunci cu o funcție de undă ψ , de forma

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_k C_k(t) \psi^{(0)}(\mathbf{r}, t) \quad (8.10.42)$$

($\psi_k^{(0)}(\mathbf{r}, t)$ — fiind soluțiile ecuației $i\hbar \frac{\partial \psi_k^{(0)}}{\partial t} = \hat{H}_0 \psi_k^{(0)}$), introdusă în ecuația (8.10.41) și prin înmulțirea la stînga a expresiei obținute cu $\psi_m^{(0)*}(\mathbf{r}, t)$ și integrare rezultă

$$i\hbar \frac{dC_m}{dt} = \sum_k H'_{mk} \cdot e^{i\omega_{mk}t} \cdot C_k(t) \quad (8.10.43)$$

H'_{mk} fiind elementele de matrice ale perturbației \hat{H}' , de forma (8.10.23), iar

$$\omega_{mk} = \frac{1}{\hbar} (E_m - E_k). \quad (8.10.44)$$

Luînd în considerare dezvoltarea

$$C_k(t) = C_k^{(0)}(t) + C_k^{(1)}(t) + \dots, \text{ cu } C_k^{(0)}(0) = \delta_{nk} \quad (8.10.45)$$

(ceea ce înseamnă că pentru $t \leq 0$ sistemul cuantic este neperturbat) și menținând în ecuația (8.10.43) numai termenii mici de ordinul întâi ($H'_{mn} C_k^{(1)}(t) \simeq 0$), atunci prin integrare în raport cu timpul se obține :

$$C_{mn}^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t H'_{mn} e^{i\omega_{mn}t} dt. \quad (8.10.46)$$

Acest rezultat ne arată că starea sistemului s-a modificat în timp sub acțiunea perturbației \hat{H}' . Desigur că o astfel de modificare, respectiv o astfel de tranziție a sistemului dintr-o stare staționară în altă stare staționară se va produce numai sub acțiunea unor perturbații dependente de timp ($\hat{H}' = \hat{H}'(t)$). Deoarece tranzițiile de acest fel sînt frecvente la nivel cuantic (atomic, nuclear și subnuclear — al particulelor elementare), vom analiza în continuare, succint, modul de descriere a lor.

Vom presupune că perturbația $\hat{H}'(t)$ este o funcție armonică de timp, de tipul operatorului energiei oscilatorului liniar armonic (8.8.77). Atunci, punînd

$$\hat{H}'(t) = \begin{cases} \hat{H}' e^{-i\omega t} + (\hat{H}')^* e^{i\omega t}; & t > 0 \\ 0; & t \leq 0 \end{cases} \quad (8.10.47)$$

din (8.10.46) se obține :

$$C_{mn}^{(1)} = \frac{1}{\hbar} \left[H'_{mn} \frac{e^{i(\omega_{mn}-\omega)t}}{\omega_{mn}-\omega} + H'_{mn}^* \frac{e^{i(\omega_{mn}+\omega)t}}{\omega_{mn}+\omega} \right]. \quad (8.10.48)$$

Probabilitatea tranziției este dată de $|C_{mn}^{(1)}|^2$ și va avea, firește, o valoare maximă atunci cînd $|E_m - E_n| \simeq \hbar\omega$, deci atunci cînd $\omega_{mn} \simeq \omega$. Dar, în aceste condiții, al doilea termen din (8.10.48) poate fi neglijat în comparație cu primul și se va putea scrie

$$|C_{mn}^{(1)}|^2 = \frac{4}{\hbar^2} |H'_{mn}(0)|^2 \frac{\sin^2 \left[\frac{1}{2} (\omega_{mn} - \omega)t \right]}{\left[\frac{1}{2} (\omega_{mn} - \omega) \right]^2}. \quad (8.10.49)$$

Dacă tranziția se face de pe nivelul E_n pe un grup de nivele situate (apro-piat) în jurul nivelului E_m și avînd densitatea de stări $\rho(\omega_{mn})$, atunci

$$|C_{mn}^{(1)}|^2 = \frac{4}{\hbar^2} |H'_{mn}(0)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \left[\frac{1}{2} (\omega_{mn} - \omega)t \right]}{\left[\frac{1}{2} (\omega_{mn} - \omega) \right]^2} \rho(\omega_{mn}) d\omega_{mn} \quad (8.10.50)$$

Pentru densități de stări $\rho(\omega_{mn})$ de valori ridicate în comparație cu $\left(\frac{\sin \alpha}{\alpha}\right)^2$, unde $\alpha = \frac{1}{2}(\omega_{mn} - \omega)t$, integrala din (8.10.50) se va reduce, pentru $\omega \simeq \omega_{mn}$, la forma funcției δ a lui Dirac (vezi anexa 3), astfel că

$$|C_{mn}^{(1)}|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{mn}(0)|^2 t \rho(E_m = E_n + \hbar\omega) \quad (8.10.51)$$

(deoarece

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \alpha}{\alpha^2} d\omega_{mn} = \frac{\pi t}{2} \delta(\omega_{mn} - \omega)).$$

Cu cele de mai sus, pentru densitatea w a probabilității de tranziție în unitatea de timp se va obține expresia

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{mn}(0)|^2 \delta(E_m - E_n^{(0)} - \hbar\omega) \quad (8.10.52)$$

Acest rezultat este adesea denumit „regulă de aur” în studiul tranzițiilor cuantice.

§ 8.11. ECUAȚIILE LUI DIRAC. NOȚIUNI DE MECANICĂ CUANTICĂ RELATIVISTĂ

Considerațiile făcute în paragrafele precedente sînt valabile numai pentru microparticule nerelativiste ($v \ll c$). Adesea însă microparticulele manifestă un comportament relativist și acest lucru este bine dovedit de experiență. Există caracteristici ale fenomenelor fizice la scară microcosmică ce nu pot fi explicate în cadrul teoriilor cuantice nerelativiste. De aceea s-a pus problema creării unor teorii cuantice relativiste, respectiv a construirii unor ecuații pentru funcția de undă, pe baza legilor mecanicii relativiste.

Problema a fost rezolvată de către Dirac, în anul 1928, prin celebrele sale ecuații. Este de notat că aceste ecuații se obțin într-un mod cu totul analog celui folosit în cazul ecuațiilor lui Schrödinger. Anume, se construiește un operator hamiltonian \hat{H} , plecînd de la expresia relativistă (3.6.17) a hamiltonianului clasic care descrie starea de mișcare a unei microparticule relativiste, într-un câmp de forțe ce derivă dintr-o funcție potențială $V(\mathbf{r})$.

Se va obține evident

$$\hat{H} = \pm c \sqrt{\hat{\mathbf{p}}^2 + m_e^2 c^2} + V(\mathbf{r}). \quad (8.11.1)$$

Dar cu un astfel de hamiltonian rezultă o ecuație de undă neliniară, care, așa cum se va arăta în §12.3, nu descrie starea de mișcare cuantică a electronilor, ci a nucleonilor din nucleu. De aceea, Dirac încearcă și reușește să liniarizeze operatorul \hat{H} , dat de (8.11.1), scriindu-l sub formă [28]:

$$\hat{H} = c \sum_{k=1}^4 \alpha_k \hat{p}_k + V(\mathbf{r}); \quad \hat{p}_k = (\hat{p}_1 = \hat{p}_x; \hat{p}_2 = \hat{p}_y; \hat{p}_3 = \hat{p}_z; \hat{p}_4 = m_e c). \quad (8.11.2)$$

Se observă că coeficienții α_k trebuie să satisfacă relații de forma

$$\alpha_k \alpha_j + \alpha_j \alpha_k = 2\delta_{kj} = \begin{cases} 2; & j = k \\ 0; & j \neq k \end{cases} \quad (8.11.3)$$

pentru ca, prin ridicare la pătrat a expresiei din partea dreaptă a lui (8.11.2) să se obțină partea de sub radical a expresiei (8.11.1). Dirac constată că condițiile (8.11.3) sînt satisfăcute de anumite matrice pătratice* denumite astăzi *matrice Dirac*. Ele au forma

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \alpha_3 = \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \alpha_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (8.11.4)$$

Într-adevăr, se vede că

$$\begin{aligned} \alpha_1 \alpha_2 + \alpha_2 \alpha_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \\ &+ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \end{pmatrix} = 0 \end{aligned}$$

* Condițiile (8.11.3) pot fi satisfăcute și de numere hipercomplexe [77].

În mod analog se poate arăta că: $\alpha_1 \alpha_1 + \alpha_2 \alpha_2 = 2$ ș.a.m.d. Atunci, ecuația pentru valori proprii E staționare ale unui astfel de operator hamiltonian va fi dată de expresia

$$c(\alpha_1 \hat{p}_1 + \alpha_2 \hat{p}_2 + \alpha_3 \hat{p}_3 + \alpha_4 \hat{p}_4) \psi = (E - V(\mathbf{r})) \psi \quad (8.11.5)$$

Această expresie conține, de fapt, patru ecuații distincte, întrucât cu (8.11.4) ea trebuie scrisă astfel

$$c \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \hat{p}_1 + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \hat{p}_2 + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \hat{p}_3 + \right. \\ \left. + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \hat{p}_4 \right] \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = (E - V(\mathbf{r})) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad (8.11.6)$$

unde în locul unei singure funcții de undă s-a folosit un *vector coloană*, format din patru componente (ψ_1, ψ_2, ψ_3 și ψ_4). Se observă că cele patru ecuații sînt

$$\begin{aligned} c(\hat{p}_1 - i\hat{p}_2)\psi_4 + \hat{p}_3\psi_3 + \hat{p}_4\psi_1 &= (E - V)\psi_1 \\ c(\hat{p}_1 + i\hat{p}_2)\psi_3 - \hat{p}_3\psi_4 + \hat{p}_4\psi_2 &= (E - V)\psi_2 \\ c(\hat{p}_1 - i\hat{p}_2)\psi_2 + \hat{p}_3\psi_1 + \hat{p}_4\psi_3 &= (E - V)\psi_3 \\ c(\hat{p}_1 + i\hat{p}_2)\psi_1 - \hat{p}_3\psi_2 + \hat{p}_4\psi_4 &= (E - V)\psi_4. \end{aligned} \quad (8.11.7)$$

■ Acestea constituie o formă explicită a *ecuațiilor Dirac*. Este interesant de remarcat că un hamiltonian de forma (8.11.2) nu comută cu componentele (8.5.17) ale operatorului moment cinetic al mișcării electronului într-un câmp central de forțe (*moment cinetic orbital*).

Într-adevăr, de exemplu

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{L}_x]_- &= (c \sum_k \alpha_k \hat{p}_k + V(\mathbf{r})) \hat{L}_x - \hat{L}_x (c \sum_k \alpha_k \hat{p}_k + V(\mathbf{r})) = \\ &= c(\hat{p}_x \alpha_1 + \hat{p}_y \alpha_2 + \hat{p}_z \alpha_3) (\hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y) - \\ &= -(\hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y) c(\hat{p}_x \alpha_1 + \hat{p}_y \alpha_2 + \hat{p}_z \alpha_3) = \\ &= -i c \hbar (\alpha_2 \hat{p}_z - \alpha_3 \hat{p}_y) \neq 0. \end{aligned} \quad (8.11.8)$$

În schimb, dacă $\hat{\mathbf{L}}_i$ se adună vectorial cu operatorul unui alt moment cinetic, de forma

$$\hat{\mathbf{L}}_s = \frac{1}{2} \hbar \hat{\mathbf{S}}, \quad (8.11.9)$$

în care prin $\hat{\mathbf{S}}(\hat{S}_1, \hat{S}_2, \hat{S}_3)$ s-au notat următoarele trei matrice

$$\begin{aligned} \hat{S}_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = i\alpha_2\alpha_3; & \hat{S}_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix} = -i\alpha_3\alpha_1; \\ \hat{S}_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \alpha_2\alpha_3, \end{aligned} \quad (8.11.10)$$

atunci, prin calcule simple se obține

$$\begin{aligned} \hat{H}\hat{L}_{s_1} - \hat{L}_{s_1}\hat{H} &= \frac{1}{2} \hbar (c \sum_k \hat{p}_k \alpha_k + V(\mathbf{r})) \hat{S}_1 - \frac{1}{2} \hbar \hat{S}_1 (c \sum_k \alpha_k \hat{p}_k + V(\mathbf{r})) = \\ &= \frac{1}{2} \hbar c [\hat{p}_y(-i\alpha_3 - i\alpha_3) + \hat{p}_z(i\alpha_2 + i\alpha_2)] = + i\hbar c (\alpha_2 \hat{p}_z - \alpha_3 \hat{p}_y) \end{aligned} \quad (8.11.11)$$

rezultat care, împreună cu (8.11.8), asigură comutativitatea

$$[\hat{H}, (\hat{\mathbf{L}}_l + \hat{\mathbf{L}}_s)]_- = 0. \quad (8.11.12)$$

Prin urmare, operatorul hamiltonian Dirac (8.11.2) nu comută cu $\hat{\mathbf{L}}_l$, dar comută cu operatorul

$$\hat{\mathbf{L}}_j = \hat{\mathbf{L}}_l + \hat{\mathbf{L}}_s \quad (8.11.13)$$

numit *operator moment cinetic total*. Desigur că întrucât operatorul $\hat{\mathbf{L}}_l$ este atașat momentului cinetic orbital, $\hat{\mathbf{L}}_s$ va trebui să fie atașat unui moment cinetic propriu \mathbf{L}_s , care a primit numele de *spin* (în engleză spin înseamnă fus, titirez).

De remarcă că componenta \hat{L}_{s_3} , a operatorului $\hat{\mathbf{L}}_s$, dată de expresia

$$\hat{L}_{s_3} = \frac{1}{2} \hbar \hat{S}_3 = \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (8.11.14)$$

are o ecuație de valori proprii de forma

$$\hat{L}_{s_3} \chi(s) = \langle L_{s_3} \rangle \chi(s) \quad (8.11.15)$$

$\chi(s)$ fiind o funcție de undă de spin. Dar ecuația (8.11.15) este satisfăcută numai pentru următoarele două valori proprii

$$\langle L_{s_3} \rangle = \pm \frac{1}{2} h \quad (8.11.16)$$

ceea ce înseamnă că componenta L_{s_3} a spinului poate să aibă numai două valori proprii ($\pm h/2$). În schimb, în ecuațiile lui Dirac sînt patru funcții de undă, nu două. Dirac nu pune pe seama vreunei degenerări această diferență, ci atribuie (în anul 1931) o semnificație fizică specifică și o existență reală stărilor microparticulei în care $H = -c\sqrt{p^2 + m_e^2 c^2} < 0$. Potrivit concepției lui Dirac aceste stări, cu energie totală negativă, descrise de două dintre cele patru funcții de undă (ψ_1, ψ_2, ψ_3 și ψ_4), sînt distribuite în mod cvasicontinuu, de la $-\infty$ pînă la $-m_e c^2$, la fel cum stările cu energie totală pozitivă sînt distribuite cvasicontinuu de la $+m_e c^2$ pînă la $+\infty$ (fig. 8.11.1). Se obțin astfel două benzi permise de energie, între care se interpune o bandă interzisă, cu lărgimea egală cu $2m_e c^2$.

Dacă se admite că în condiții de vid toate stările cu $E \leq -m_e c^2$ sînt complet populate cu electroni (de aceea sînt prezentate prin hașură dublă) și toate stările cu $E \geq +m_e c^2$ sînt complet libere (hașură simplă),

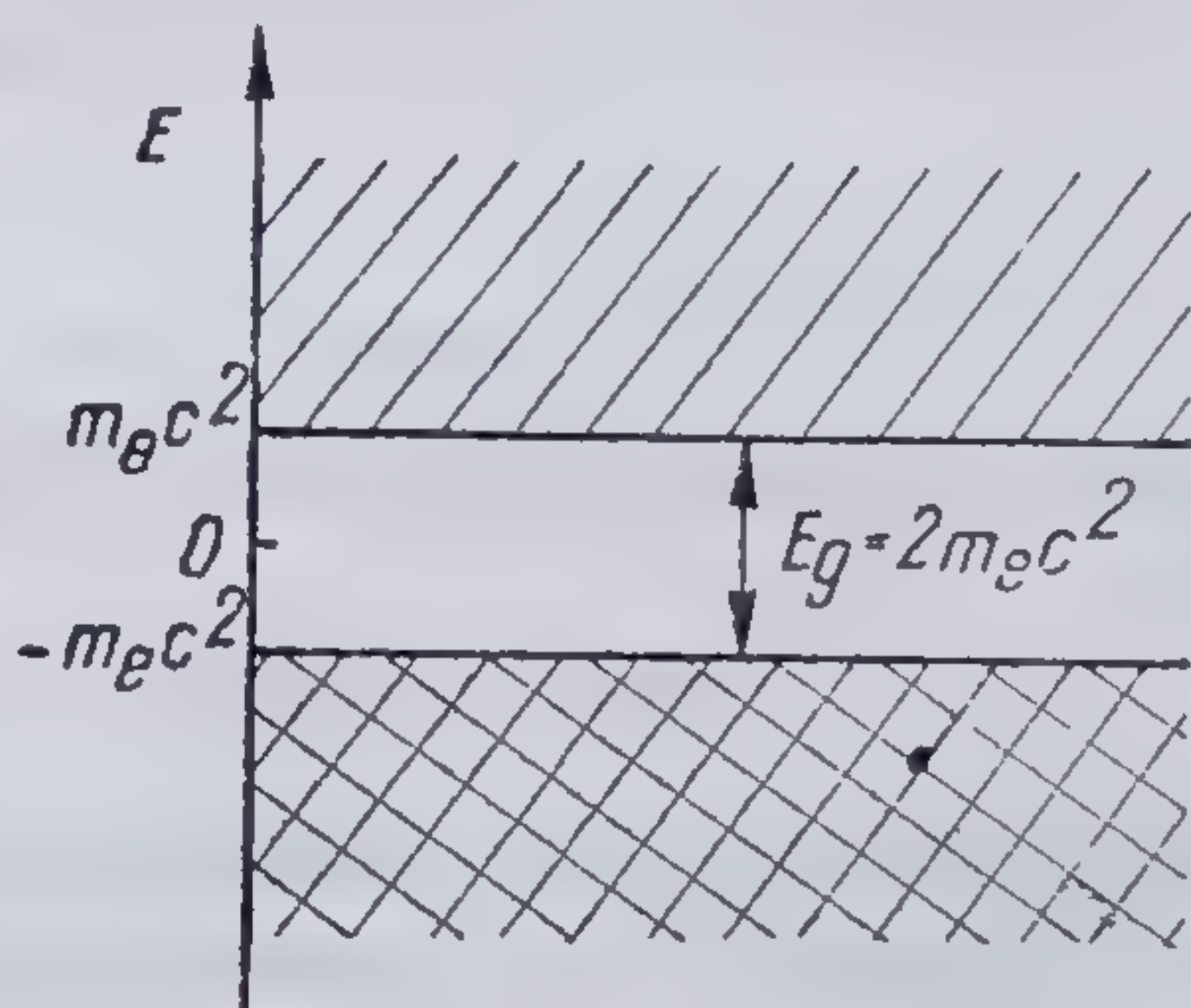


Fig. 8.11.1

atunci înseamnă că săltarea unui electron din banda inferioară în cea superioară (proces realizabil prin absorbția unei cuante de energie, egală cu $2m_e c^2 = 1,02 \text{ MeV}$ va conduce la generarea unei perechi *electron-gol*, respectiv la apariția unui electron liber (în banda $E \geq m_e c^2$) și a unei „vacanțe” (lipsa unui electron, în banda $E \leq -m_e c^2$), denumită *gol*, acesta jucînd aici rol de *antiparticulă* a electronului, adică de *pozitron*. O astfel de imagine intuitivă a fost ulterior confirmată de experiență, prin descoperirea în anul 1932 de către Anderson a *pozitronului* (§12.10). Ea poate fi generalizată și pentru cazul altor perechi particulă-antiparticulă.

Pe baza celor expuse mai sus se poate conchide că spinul este un moment cinetic propriu al microparticulelor, fiind determinat de relați-

vitătea mișcării acestora. Prin alegerea operatorului \hat{L}_s de forma (8.11.9), se pot obține ușor atât valorile proprii $\langle L_i \rangle$, cât și funcțiile de undă proprii ale operatorului spin, funcții denumite adesea *spinori*. Pentru spinul electronic, se observă din (8.11.9) că avem

$$\hat{L}_s^2 = \hat{L}_{s_x}^2 + \hat{L}_{s_y}^2 + \hat{L}_{s_z}^2 = \hbar^2 \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{2} \right) \hat{I} \quad (8.11.17)$$

(\hat{I} -fiind matricea unitate), ceea ce înseamnă că din

$$\hat{L}_s^2 \chi(s) = \langle L_s^2 \rangle \chi(s) \quad (8.11.18)$$

se obține

$$\langle L_s^2 \rangle = \hbar^2 s(s+1); s = 1/2 \quad (8.11.19)$$

s-jucând aici rol de *număr cuantic de spin*. Pentru electron, numărul cuantic de spin s are valoare semiîntreagă $\left(s = \frac{1}{2} \right)$.

Desigur, putem introduce prin analogie cu (8.8.129) și un *număr cuantic magnetic de spin* m_s , pentru exprimarea valorilor cuantificate ale lui $\langle L_z \rangle$. Punînd:

$$\langle L_{s_z} \rangle = \hbar m_s; \quad m_s = \pm \frac{1}{2} \quad (8.11.20)$$

se vede, prin compararea acestei expresii cu (8.11.16), că numărul cuantic magnetic de spin are pentru electron numai două valori și anume $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Pentru momentul magnetic de spin se va obține expresia:

$$\langle \mu_{s_z} \rangle = \gamma_s \langle L_{s_z} \rangle = \gamma_s \hbar m_s \quad (8.11.21)$$

γ_s fiind raportul giromagnetic de spin. Într-un câmp magnetic, de inducție \mathbf{B} , un astfel de moment își va modifica energia potențială cu mărimea

$$W_B = - \langle \mu_{s_z} \rangle B = - \gamma_s \hbar B m_s \quad (8.11.22)$$

și deci spinul se va putea găsi numai în două stări energetice, paralel și orientat în același sens cu \mathbf{B} , respectiv paralel și orientat în sens invers lui \mathbf{B} (după cum $m_s = +1/2$ sau $m_s = -1/2$).

De notat că toate aceste caracteristici intrinseci ale spinului au putut fi probate prin experimente directe. Unul dintre aceste experimente, realizat de Stern și Gerlach în anul 1923, se bazează pe acțiunea unui câmp magnetic neomogen ($\nabla B \neq 0$) asupra particulelor purtătoare de moment magnetic. Experiența de tip Stern-Gerlach este schițată în figura 8.11.2.

Se observă că forța F_{m_s} , cu care cîmpul magnetic B acționează asupra fascicului de electroni, dată de expresia

$$F_{m_s} = - \nabla W_B = \gamma_s h (\nabla B) m_s \quad (8.11.23)$$

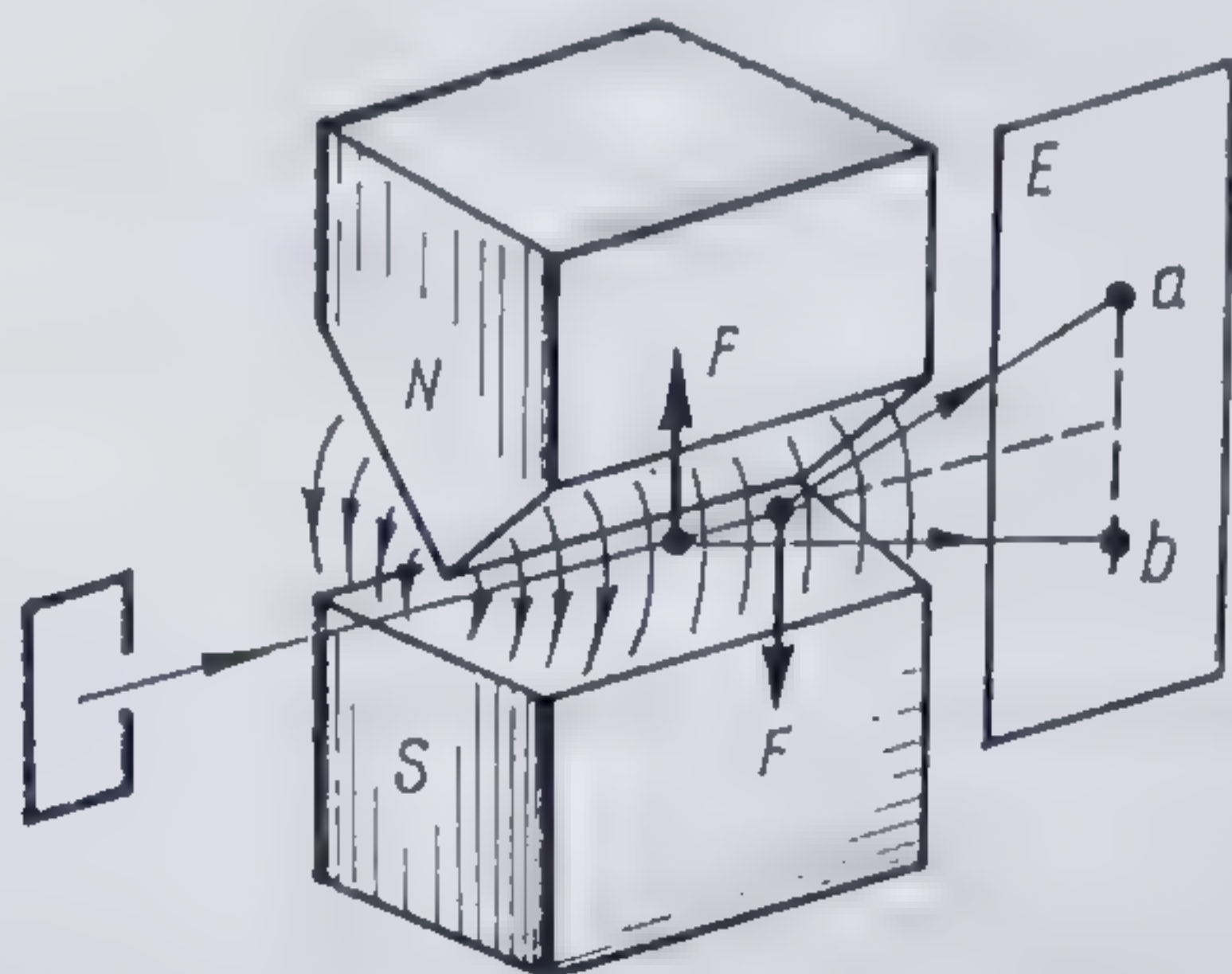


Fig. 8.11.2

are doar două valori posibile (corespunzătoare la $m_s = \pm \frac{1}{2}$). De aceea, fasciculul se va descompune în două componente, determinînd pe ecranul (E) un dublet (a, b). Apariția acestui dublet a confirmat în mod strălucit ipoteza existenței spinului electronic, pe care Uhlenbeck și Goudsmith au formulat-o încă în anul 1921.

S-a remarcat mai sus că mișcarea cuantică de spin poate fi descrisă prin numai două din cele patru funcții de undă care intră în ecuațiile lui Dirac (8.11.7), ceea ce înseamnă că operatorul moment cinetic de spin electronic poate fi exprimat și prin matrice pătrate de rangul al doilea, de forma :

$$\hat{L}_{s_x} = \frac{h}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \hat{L}_{s_y} = \frac{h}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \hat{L}_{s_z} = \frac{h}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (8.11.24)$$

Aceste matrice sînt cunoscute sub denumirea de *matrice Pauli*. Dacă se ține seama și de faptul că \hat{L}_{s_z} exprimă, potrivit relației (8.8.127), o rotație cu un anumit unghi φ în jurul axei Ox și că această componentă a operatorului \hat{L}_s este reprezentată de o matrice diagonală, atunci ecuația (8.11.15) se va putea scrie sub forma

$$-i\hbar \frac{d\chi(\varphi)}{d\varphi} = m_s \hbar \chi(\varphi) \quad (8.11.15')$$

din care prin integrare rezultă

$$\chi_{m_s}(\varphi) = \chi_{m_s}(0) e^{im_s \varphi} \quad (8.11.25)$$

Se observă că la o rotație completă cu 2π , aceste funcții proprii se transformă astfel

$$\chi'_{m_s}(2\pi) = \chi_{m_s}(0) e^{2\pi i m_s} = \chi_{m_s}(0) (-1)^{2m_s} \quad (8.11.26)$$

ceea ce înseamnă că pentru $m_s = \pm 1/2$ (și în general $m_s = \frac{2n+1}{2}$) funcția de undă își schimbă semnul, iar pentru $m_s = \pm 2n$, ($n = 0, 1, 2, \dots$), funcția de undă $\chi_{m_s}(\varphi)$ nu-și schimbă semnul. Pentru electron vor exista două funcții de undă de spin proprii $\chi(1/2)$ și $\chi(-1/2)$, care, dat fiind faptul că $[\hat{L}_s^2, \hat{L}_{sz}]_- = 0$, vor fi în același timp și funcții proprii pentru \hat{L}_s^2 . Aceste funcții pot fi prezentate sub forma

$$\chi = \begin{pmatrix} \chi(1/2) \\ \chi(-1/2) \end{pmatrix} \quad (18.11.27)$$

și poartă numele de *spinor*. Denumirea provine de la comportarea specifică a unei astfel de funcții față de rotație ($\chi'_{m_s}(\varphi + 4\pi) = \chi_{m_s}(\varphi)$).

Este evident că în aceste condiții starea cuantică a unei microparticule va fi descrisă de o funcție de undă ce va depinde și de spinul acesteia. În cazul unei interacții slabe între mișcarea de spin și mișcarea orbitală, această dependență va fi de forma :

$$\psi_{as}(x, y, z, t, s_z) = \psi(x, y, z, t) \cdot \chi(s_z) \quad (8.11.28)$$

ψ_{as} fiind o funcție antisimetrică pentru particulele cu spin semiîntreg și simetrică pentru cele cu spin întreg.

Utilizarea ecuațiilor lui Dirac la studiul atomului a adus informații suplimentare, îndeosebi legate de studiul *structurii fine a liniilor spectrale* (§ 10.3). De asemenea, luarea în considerație și a câmpului electromagnetic a condus la formularea electrodinamicii cuantice (§12.10.3). Dar cu toate că ecuațiile lui Dirac s-au dovedit proprii studiului electronilor, rezultatele la care ele conduc fiind riguros verificate de experiență pentru electroni cu energia de pînă la 100 GeV, aceste ecuații s-au dovedit inadecvate pentru studiul protonului. Protonul are un moment magnetic mult mai mare decît cel prezis de ecuațiile lui Dirac (§ 12,2) și aceasta pare să ne spună că, în timp ce electronii sînt, într-adevăr, particule elementare (vezi §12.10), nucleonii sînt, în schimb, particule complexe.

Elemente de mecanică statistică cuantică

§ 9.1. CONSECINȚE ALE CUANTIFICĂRII SPAȚIULUI FAZELOR

În capitolul V s-a văzut că la baza mecanicii statistice clasice stă ipoteza posibilității descrierii prin intermediul legilor mecanicii clasice a mișcării microparticulelor ce constituie un anumit sistem termodinamic. Rezultatele care se obțin pe baza unei astfel de ipoteze sînt, într-o serie de cazuri, bine confirmate de experiență. Așa, de exemplu, teoria statistică a căldurilor specifice ale gazelor (§ 5.3) și ale solidelor (§ 5.4) conduce la rezultate în concordanță cu datele experimentale, pentru temperaturi nu prea scăzute.

Există însă și situații în care rezultatele la care ajung studiile statistice clasice sînt infirmate categoric de experiență. La solide, de exemplu, se înregistrează experimental o scădere spre zero a căldurii specifice pe măsură ce temperatura absolută este micșorată spre 0 K, așa cum arată graficul din fig. 9.1.1. Se observă că rezultatul lui Dulong și Petit (5.4.7) este valabil numai ca un rezultat limită, pentru temperaturi ridicate. În cazul radiațiilor termice s-a văzut (§ 8.1.1) că studiul statistic clasic conduce de asemenea la rezultate eronate.

Există apoi, așa cum a semnalat pentru prima dată Max Planck, o vădită contradicție între rezultatele la care ajunge mecanica statistică clasică și principiul al treilea al termodinamicii, care cere, potrivit formulării (4.2.22), ca la $T \rightarrow 0$ K, entropia S a oricărui sistem termodinamic să tindă la zero ($S \rightarrow 0$). Or, dacă se are în vedere rezultatul (5.3.40), care exprimă entropia unui kilomol de gaz perfect prin formula

$$S = C_v \ln T + R \ln V + S_0 \quad (9.1.1)$$

se observă că pentru $T \rightarrow 0$ K, entropia $S \rightarrow -\infty$.

Plecînd de la intuiția că entropia este legată direct de descrierea statistică a unui sistem termodinamic și analizînd contradicțiile de mai sus, Planck ajunge la concluzia că aceste contradicții se datoresc unei

valabilități limitate a legilor mecanicii clasice pentru mișcările existente la scara atomică și subatomică. Prin elaborarea teoriei cuantelor, el este și primul care sugerează, prin câteva idei, calea ce trebuie urmată pentru construirea unei mecanici statistice cuantice. Una dintre aceste idei are în vedere cuantificarea energiei microparticulelor, care implică imposibilitatea compartimentării spațiului fazic (§ 2.11) în elemente de volum oricât de mici.

Într-adevăr, pentru un sistem format din N microparticule identice (de aceeași masă), dar discernabile*, aflate într-o mișcare cuantică de

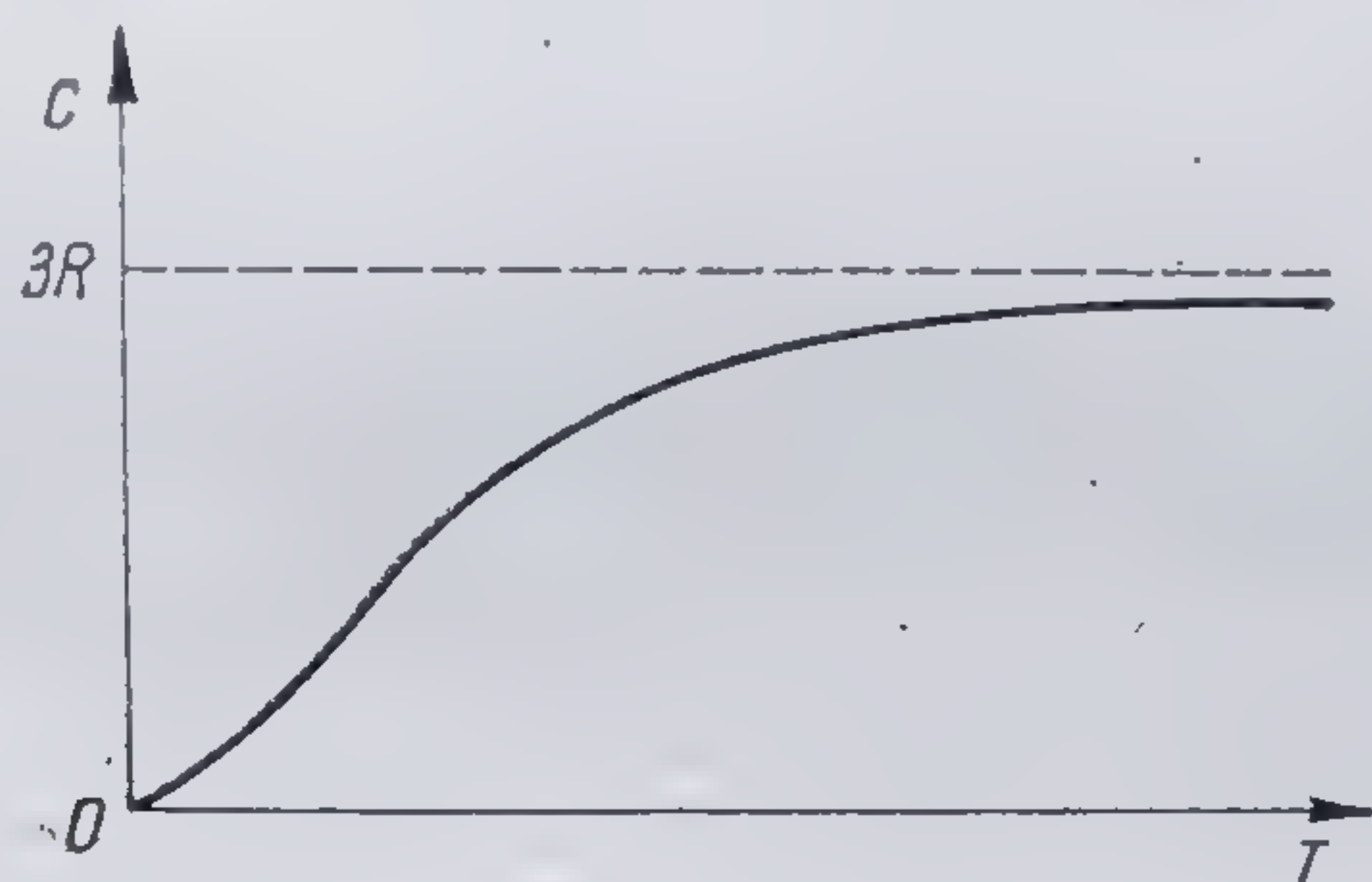


Fig. 9.1.1

translație liberă, în interiorul unei incinte cubice de muchie L , s-a văzut în § 8.8.3 că valorile cuantificate ale energiei unei particule sînt date de expresia (8.8.30) și că fiecare nivel energetic E_n este degenerat de g_i ori, deci îi vor corespunde g_i funcții de undă, de forma (8.8.28).

Pentru aflarea volumului minim $\Delta\Gamma_{min}$ din spațiul fazic care revine unei stări cuantice a sistemului, trebuie observat că la trecerea de la o stare cuantică la alta intervin variații ale numerelor cuantice de translație n_x, n_y, n_z cu cîte o unitate întreagă. Atunci, întrucît pentru o microparticulă din sistem se va putea scrie, în conformitate cu (8.8.29), relația

$$\Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z = h^3 \left(\frac{2\pi}{L} \right)^3 \Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z = \frac{h^3}{\mathcal{V}} \quad (9.1.2)$$

pentru N microparticule, cu $3N$ grade de libertate, vom avea

$$\Delta\Gamma_{min} = \prod_i^{3N} \Delta p_{x_i} \Delta x_i = h^{3N}. \quad (9.1.3)$$

Desigur că pentru un sistem cu r grade de libertate

$$\Delta\Gamma_{min} = h^r \quad (9.1.4)$$

Să vedem în continuare cum poate fi stabilită distribuția microparticulelor pe diversele stări cuantice astfel posibil, în condiții de echi-

* Numim discernabile particulele care își păstrează identitatea după ciocnire, în sensul că dacă la ciocnire participă particula A și particula B, atunci după ciocnire se poate preciza care anume este particula A și care particula B.

libru termodinamic. În acest scop, ne vom folosi de spațiul fazic (μ), care așa cum s-a văzut în §5.3 este un spațiu 6-dimensional, în care starea cuantică a fiecărei microparticule este reprezentată printr-un punct figurativ, numit *fază*. Dacă se împarte acest spațiu în mai multe celule elementare, de volum $\Delta\Gamma_{mtn}$, atunci fiecărui nivel energetic E_i , degenerat de g_i ori, îi vor corespunde g_i astfel de celule. Numărul de moduri distincte W , în care pot fi distribuite cele N particule ale sistemului pe celulele elementare ale spațiului (μ) în așa fel încît fiecărui nivel E_i să-i aparțină n_i microparticule, va fi dat de numărul de permutări distincte ce se pot efectua cu cele n_i microparticule pe cele g_i stări aparținînd respectivului nivel E_i . Acest număr de permutări va reprezenta în același timp și numărul de microstări ale sistemului compatibile cu starea termodinamică dată, respectiv probabilitatea termodinamică W_{termo} a respectivei microstări termodinamice.

Se va obține, evident, egalitatea

$$\prod_{i=1}^{3N} n_i! \cdot W = N! \prod_i g_i^{n_i} \quad (9.1.5)$$

din care rezultă

$$W = N! \prod_i \frac{g_i^{n_i}}{n_i!} = W_{termo} \quad (9.1.6)$$

Distribuția cea mai probabilă poate fi găsită prin *metoda multiplicatorilor Lagrange*. În acest scop, se admite că o astfel de distribuție corespunde stării de echilibru termodinamic, în care mărimile

$$S = k_b \ln W_{termo}; \quad N = \sum n_i; \quad E = \sum n_i E_i \quad (9.1.7)$$

rămîn constante în timp. De aceea vom scrie egalitatea

$$\frac{1}{k_b} \delta S - \alpha \delta N - \beta \delta E = 0 \quad (9.1.8)$$

în care α și β sînt parametri, denumiți *multiplicatori Lagrange*, ce urmează a fi stabiliți ulterior, iar prin k_b s-a notat constanta Boltzmann.

Înlocuind în (9.1.8) pe (9.1.6) și ținînd cont de (9.1.7) se obține

$$\delta [\ln N! + \sum_i n_i \ln g_i - \sum_i \ln n_i! - \alpha \sum n_i - \beta \sum n_i E_i] = 0. \quad (9.1.9)$$

Vom folosi în această expresie o aproximație bazată pe formula lui Stirling [14].

$$\delta \ln n_i! \cong \ln n_i \cdot \delta n_i \quad (9.1.10)$$

care aplicată în (9.1.9), pentru $n_i \gg 1$ și $N = \text{const.}$ (și deci $\delta N = 0$), ne permite să scriem

$$\sum_i \delta n_i (\ln g_i - \ln n_i - \alpha - \beta E_i) = 0. \quad (9.1.11)$$

Această egalitate este satisfăcută numai dacă :

$$\ln g_i - \ln n_i - \alpha - \beta E_i = 0$$

deoarece δn_i a fost ales în mod arbitrar. Rezultă deci :

$$n_i = g_i e^{-\alpha - \beta E_i}$$

Pe de altă parte, din condiția $\sum_i n_i = N$, se obține

$$N = e^{-\alpha} \sum_i g_i e^{-\beta E_i}$$

astfel încît :

$$n_i = \frac{g_i e^{-\beta E_i}}{\sum_i g_i e^{-\beta E_i}}. \quad (9.1.12)$$

Se poate arăta că și în această expresie, la fel ca în expresia (5.5.2), $\beta = 1/k_b T$.

De remarcă că rezultatul (9.1.12) este analog celui obținut în statistica clasică (vezi 5.3.3), locul sumei statistice clasice, Z -fiind luat aici de o sumă statistică cuantică f , numită adesea funcție de partiție și definită prin expresia

$$f = \sum_i g_i \exp \left(-\frac{E_i}{k_b T} \right). \quad (9.1.13)$$

Desigur că atunci, corespunzător formulei (5.3.5), se va putea scrie

$$Z = f^N \quad (9.1.14)$$

cu precizarea că toate celelalte relații care leagă pe Z de funcțiile termodinamice (5.2.44 ; 5.2.45) își vor păstra valabilitatea.

Funcția de partiție este o funcție de probabilitate ca și suma statistică Z . Ea se calculează pe baza cunoașterii energiei E_i a microparticulelor în stările cuantificate precum și a gradelor de degenerare g_i ale acestora. De exemplu, în cazul unor microparticule care participă la mișcări de translație, la rotație și la vibrație, pentru care

$$E_i = E_{ti} + E_{ri} + E_{vi} \quad (9.1.15)$$

vom avea

$$f = \sum_{t_i} \sum_{r_i} \sum_{v_i} g_{t_r v} \exp [-(E_{ti} + E_{ri} + E_{vi})/k_b T] = f_t f_r f_v \quad (9.1.16)$$

Acest rezultat simplifică mult problema găsirii funcției de partiție pentru cazul mișcărilor complexe ale microparticulelor, permițînd calcularea lui f prin intermediul funcțiilor de partiție ale fiecărei mișcări simple componente.

§ 9.2. DESCRIEREA GAZULUI IDEAL ÎN STATISTICA CUANTICĂ

Pentru a obține o astfel de descriere se va presupune că moleculele gazului sînt *identice* și *punctiforme* în așa fel încît ele pot să participe doar la mișcări de translație. Dacă aceste mișcări se efectuează liber, în interiorul unei incinte cubice de muchie L , atunci, avînd în vedere expresia (8.8.30), se va putea scrie

$$f_{\text{cl}} = \sum_{n_x}^{\infty} \sum_{n_y}^{\infty} \sum_{n_z}^{\infty} \exp. \left[-\frac{h^2}{2m_0 k_b T} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \right] = f_x f_y f_z \quad (9.2.1)$$

în care s-au folosit notațiile

$$\begin{aligned} f_x &= \sum_{n_x} \exp \left[-\frac{h^2}{2m_0 k_b T} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 n_x^2 \right]; \\ f_y &= \sum_{n_y} \exp \left[-\frac{h^2}{2m_0 k_b T} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 n_y^2 \right], \dots \end{aligned} \quad (9.2.2)$$

Pentru condiții normale de temperatură vor fi populate desigur și stări cuantice cu n_x, n_y, n_z de valori ridicate, în care caz trecerea de la o stare la alta se va face practic cvasicontinuu, aceasta permițînd înlocuirea, în (9.2.2), a sumelor prin integrale. Se obține

$$f = \left\{ \int_0^{\infty} \exp \left[-\frac{h^2}{2m_0 k_b T} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 n_x^2 \right] dn_x \right\}^3 = (2\pi m_0 k_b T)^{3/2} \left(\frac{L}{h} \right)^3 \quad (9.2.3)$$

Atunci, cu $L^3 = \mathcal{V}$;

$$Z = \frac{(2\pi m_0 k_b T)^{3N/2}}{h^{3N}} \mathcal{V}^N. \quad (9.2.4)$$

Pentru energia liberă F a sistemului vom găsi, plecînd de la expresia (5.2.16)

$$F = - N k_b T \left\{ \ln \left[\frac{(2\pi m_0 k_b T)^{3/2}}{h^3} \right] + \ln \mathcal{V} \right\} \quad (9.2.5)$$

iar pentru energia liberă U

$$U = - T^2 \frac{\partial(F/T)}{\partial T} = \frac{3}{2} N k_b T. \quad (9.2.6)$$

Se constată, pe baza acestor rezultate, că presiunea gazului

$$p = - \left(\frac{\partial F}{\partial \mathcal{V}} \right)_T = \frac{N k_b T}{\mathcal{V}} \quad (9.2.7)$$

satisface legea gazelor ideale ($p\mathcal{V} = N k_b T$).

Dacă se presupune că gazul ideal este format din molecule *nepunctiforme*, care în general pot participa atât la mișcări de translație cât și la mișcări de rotație, atunci celor de mai sus trebuie să li se adauge contribuția mișcărilor de rotație pentru care, potrivit relațiilor (8.8.137) și (8.8.138), avem

$$f_r = \sum_r g_r \exp \left[-\frac{E_{ir}}{k_b T} \right] \simeq \int_0^{\infty} (2r + 1) \exp \left[-\frac{h^2}{2Ik_b T} \cdot r(r + 1) \right] dr. \quad (9.2.8)$$

Observînd că $(2r + 1) dr = d[r(r + 1)]$, prin calcule simple se obține :

$$f_r = \frac{2Ik_b T}{h^2}. \quad (9.2.9)$$

Înseamnă că energia liberă a unui sistem de rotatori cuantici va fi dată de expresia :

$$F_r = -Nk_b T \ln \frac{2Ik_b T}{h^2}. \quad (9.2.10)$$

De remarcă că, în acest caz, presiunea corespunzătoare rotației este nulă

$$p_r = - \left(\frac{\partial F_r}{\partial \mathcal{V}} \right)_T = 0. \quad (9.2.11)$$

Prin urmare, rotația nu determină un surplus de presiune gazului. De aceea, legea fundamentală a teoriei cinetico-moleculare $\left(p = \frac{1}{3} \frac{N}{\mathcal{V}} m_0 \langle v^2 \rangle \right)$ își păstrează valabilitatea și pentru sisteme gazoase formate din molecule nepunctiforme. Mișcarea de rotație va contribui, în schimb, la energia internă U a sistemului și la entropia S a gazului cu mărimile

$$U_r = -T^2 \frac{\partial \left(\frac{F_r}{T} \right)}{\partial T} = Nk_b T; \quad S_r = -\frac{\partial F_r}{\partial T} = Nk_b \ln \frac{2Ik_b T}{h^2} + Nk_b. \quad (9.2.12)$$

Ultimul rezultat pune din nou în evidență neconcordanța cu principiul al treilea al termodinamicii și anume se vede că odată cu $T \rightarrow 0$ K, $S \rightarrow -\infty$. Pentru a scăpa de acest neajuns s-a formulat ideea „înghețării” unor grade de libertate ale mișcării microparticulelor în apropiere de 0 K. Potrivit acestei idei, pe măsură ce temperatura este micșorată spre 0 K, contribuția mișcărilor de translație și de rotație la mișcarea de agitație termică a sistemului se micșorează și, la o anumită temperatură, ele dispar complet, ca și cum respectivele grade de libertate ar îngheța. O astfel de imagine intuitivă este în concordanță cu datele experimentale, care pun în evidență că la 0 K sînt înghețate toate gradele de libertate ale mișcărilor, afară de cele corespunzătoare vibrației de nul (8.8.95).

§ 9.3. STATISTICA CUANTICĂ A MIȘCĂRILOR DE VIBRAȚIE. TEORIA LUI EINSTEIN A CĂLDURILOR SPECIFICE LA SOLIDE

Mișcări de vibrație pot lua naștere sub acțiunea unor forțe de interacțiune, fie în interiorul unei microparticule (a unei molecule), fie în cadrul unei structuri cristaline. Energia stărilor de vibrație cuantificate este dată de expresia (8.8.94), aceste stări fiind nedegenerate ($g_v = 1$). Atunci funcția de partiție f_v , pentru oscilatori liniari cu trei grade de libertate va fi dată de expresia :

$$f_v = \sum_v \exp \left[-\frac{E}{k_b T} \right] = \left\{ \sum_v \exp \left[-\frac{h\nu \left(v + \frac{1}{2} \right)}{k_b T} \right] \right\}^3. \quad (9.3.1)$$

Pentru structuri cristaline (vezi §11.4), în care $\lambda \simeq 5 \text{ \AA}$ și $v = 5000 \text{ m/s}$ și deci $\frac{h\nu}{k_b} = \frac{h v}{\lambda k_b} \simeq 47$, se poate calcula chiar și la temperaturi scăzute această funcție de partiție, avînd în vedere că în (9.3.1) intervine o serie geometrică convergentă, de forma

$$\begin{aligned} \sum_v \exp \left[-\frac{h\nu}{k_b T} \left(v + \frac{1}{2} \right) \right] &= e^{-\frac{h\nu}{2k_b T}} (1 + e^{-\frac{h\nu}{k_b T}} + e^{-2\frac{h\nu}{k_b T}} + \dots) = \\ &= \frac{e^{-\frac{h\nu}{2k_b T}}}{1 - e^{-\frac{h\nu}{k_b T}}}. \end{aligned} \quad (9.3.2)$$

Atunci :

$$f_v = \left(\frac{e^{-\frac{h\nu}{2k_b T}}}{1 - e^{-\frac{h\nu}{k_b T}}} \right)^{-3} \simeq (1 - e^{-\frac{h\nu}{k_b T}})^3. \quad (9.3.3)$$

Pentru E_v și U_v se vor obține expresiile

$$E_v = -Nk_b T \ln f_v = 3Nk_b T \ln (1 - e^{-\frac{h\nu}{k_b T}}) \quad (9.3.5)$$

$$U_v = -T^2 \frac{\partial (E_v/T)}{\partial T} = \frac{3Nh\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_b T}} - 1}. \quad (9.3.6)$$

De notat că, încă în anul 1907, A. Einstein folosește aceste rezultate pentru calcularea dependenței de temperatură a căldurilor molare la volum constant ale corpurilor solide și obține o scădere spre zero a acestora o dată cu $T \rightarrow 0 \text{ K}$, așa cum cere experiența.

Într-adevăr, din (9.3.6); cu $N = N_A$ și $N_A k_b = R$ rezultă

$$C_v(T) = -\frac{\partial U}{\partial T} \simeq 3R \left(\frac{h\nu}{k_b T} \right)^2 e^{-\frac{h\nu}{k_b T}}. \quad (9.3.7)$$

Cu toate că acest rezultat descrie doar calitativ scăderea spre zero a căldurii molare a solidelor în apropiere de 0 K (fig. 9.3.1), importanța sa a fost deosebită, deoarece a arătat că prin metodele statisticii cuantice se pot înlătura insuficiențele mecanicii statistice clasice.

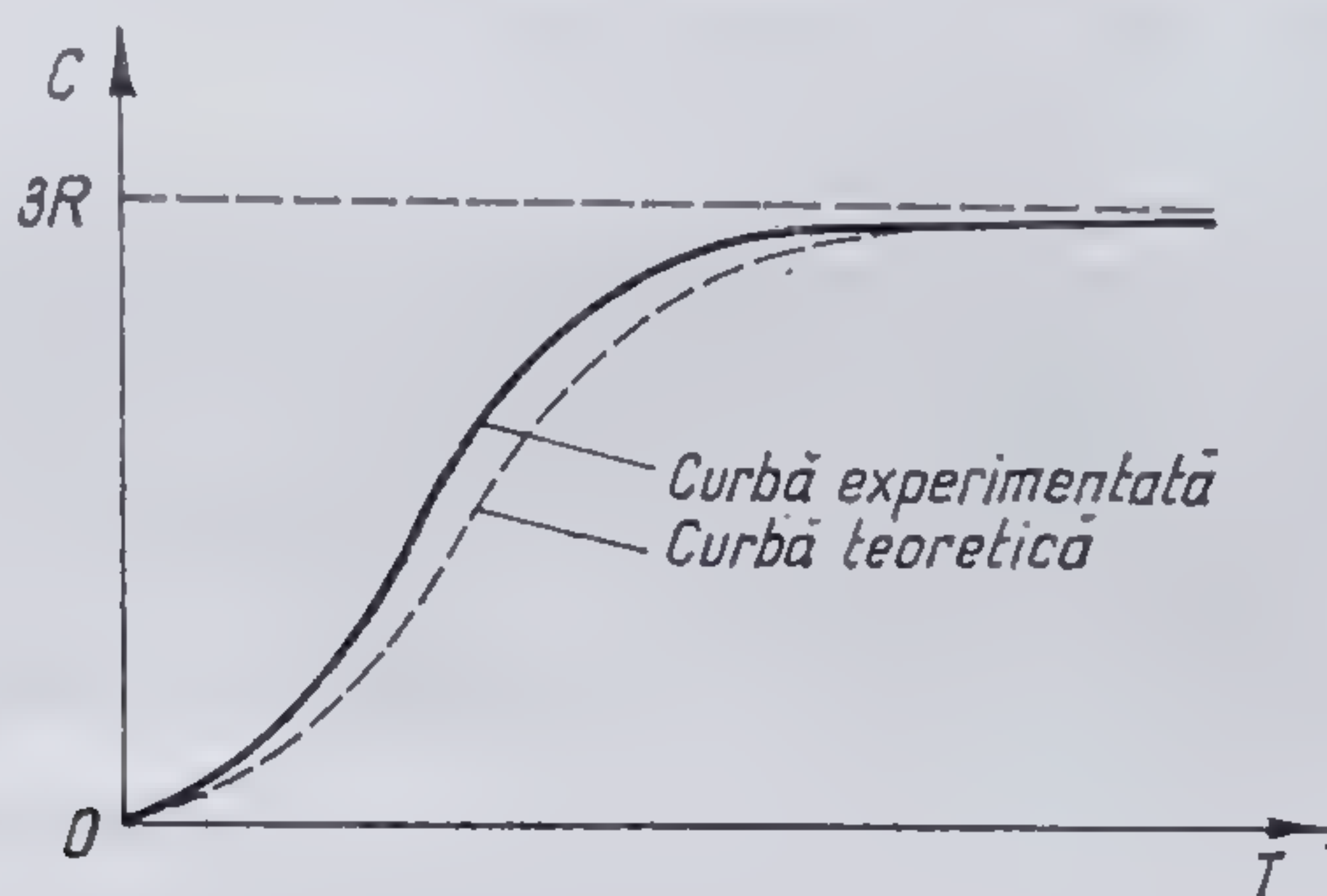


Fig. 9.3,1

§ 9.4. PRINCIPIUL IDENTITĂȚII MICROPARTICULELOR ȘI PRINCIPIUL DE EXCLUZIUNE. DISTRIBUȚIA FERMI-DIRAC ȘI DISTRIBUȚIA BOSE-EINSTEIN

Considerațiile făcute în precedentele trei paragrafe nu au ținut seama de alte două aspecte specifice microparticulelor cu comportament cuantic [38, 61, 103]. Primul este exprimat de principiul *identității microparticulelor*, care stabilește că toate microparticulele aflate în aceeași stare cuantică sînt *identice și nediscernabile*. După expresia lui Einstein, electronii aflați în aceeași stare cuantică nu pot fi deosebiți între ei, deoarece ei „nu pot fi colorați în culori diferite pentru a putea preciza după o ciocnire între un electron 1 și un electron 2, care anume este electronul 1 și care este electronul 2”. Din această pricină, starea cuantică a unui sistem de microparticule identice și, desigur, însăși funcția de undă ψ care descrie o astfel de stare nu trebuie să se modifice atunci cînd se permută între ele două microparticule identice din sistem.

Să urmărim, în continuare, cum se poate exprima în limbaj cuantic o astfel de operație de permutare. Pentru un sistem format din N microparticule identice, descris printr-un operator hamiltonian de forma

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta_i + \hat{V}(x_i, t) \right] + \sum_{i \neq k} \hat{W}(x_i, t) \quad (9.4.1)$$

în care \hat{W} exprimă interacția dintre microparticulele sistemului, vom introduce un operator de permutare \hat{P}_{ik} , prin care vom exprima operația de permutare a microparticulei „i” cu microparticula „k”, adică :

$$\hat{P}_{ik} \psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_k, \dots, x_N, t) = \psi(x_1, \dots, x_k, \dots, x_i, \dots, x_N, t). \quad (9.4.2)$$

Se constată că acest operator \hat{P}_{ik} comută cu \hat{H} , adică

$$[\hat{P}_{ik}, \hat{H}]_- = 0. \quad (9.4.3)$$

Rezultă astfel că starea cuantică a sistemului va rămâne invariantă față de permutarea reciprocă a microparticulelor. Aceasta impune ca funcția de undă ψ să fie concomitent atât soluția ecuației Schrödinger temporale (8.6.9), cât și soluția ecuației

$$\hat{P}_{ik} \psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_k, \dots) = \langle P_{ik} \rangle \psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_k, \dots) \quad (9.4.4)$$

astfel încât din (8.6.9) și (9.4.3) rezultă că putem scrie

$$i\hbar \left(\hat{P}_{ik} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) = \hat{P}_{ik} \hat{H} \psi = \hat{H} (\hat{P}_{ik} \psi) \quad (9.4.5)$$

Atunci și funcția de undă ψ' , dată de transformarea

$$\psi'(x_1, \dots, x_k, \dots, x_i, \dots) = \hat{P}_{ik} \psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_k, \dots), \quad (9.4.6)$$

va fi o soluție a ecuațiilor (8.6.9) și (9.4.4). Se vede că $\hat{P}_{ik} \psi' = \psi$ astfel că

$$\hat{P}_{ik}^2 \psi = \langle P_{ik} \rangle^2 \psi \quad (9.4.7)$$

ceea ce înseamnă că operatorul permutare \hat{P}_{ik} are numai următoarele două valori proprii și anume :

$$\langle \hat{P}_{ik} \rangle = \pm 1. \quad (9.4.8)$$

Vor exista deci două categorii distincte de funcții de undă și anume, funcția de undă simetrică ψ_s pentru care

$$\hat{P}_{ik} \psi_s = (+1) \psi_s \quad (9.4.9)$$

și funcția de undă antisimetrică ψ_a , pentru care :

$$\hat{P}_{ik} \psi_a = (-1) \psi_a \quad (9.4.10)$$

De reținut că întrucât operatorul \hat{P}_{ik} comută cu \hat{H} , stările descrise la un moment dat prin funcții de undă simetrice (respectiv prin antisimetrice)

își păstrează această calitate pentru orice moment ulterior de timp. De aceea se poate spune că cele două tipuri de funcții de undă descriu două clase distincte de microparticule identice.

S-a menționat în §8.11. că prin funcții de undă antisimetrice se descriu stări cuantice ale particulelor cu spin semiîntreg, iar prin funcții de undă simetrice, ale celor cu spin întreg. Cele două tipuri de microparticule vor fi deci distincte între ele, în sensul că nu vor putea trece una în alta. Microparticulele cu spin întreg au primit numele de *bosoni* (după numele fizicianului indian, S. Bose), iar cele cu spin semiîntreg de *fermioni* (după numele fizicianului italian, E. Fermi) și așa cum se va arăta în continuare, un gaz perfect constituit din bosoni sau fermioni se supune unor legi de distribuție statistică diferite. Distincția între microparticule cu spin întreg și cele cu spin semiîntreg se poate atribui faptului că o microparticulă cu spin întreg poate fi considerată ca o microparticulă „complexă”, formată dintr-un număr par de particule cu spin 1/2, iar cele cu spin semiîntreg, dintr-un număr impar de particule cu spin 1/2 (vezi și §12.3). De aceea, permutarea a doi fermioni este echivalentă cu permutarea unui număr impar de particule cu spin 1/2, funcția de undă schimbându-și semnul în urma acestei operații, iar permutarea a doi bosoni este echivalentă cu permutarea unui număr par de particule cu spin 1/2, funcția de undă neschimbându-și semnul în urma acestei operații.

Să vedem în continuare cum trebuie construite funcțiile de undă pentru ansambluri de bosoni, respectiv de fermioni, în așa fel încât primele să fie funcții de undă simetrice, iar ultimele, funcții de undă antisimetrice. Dacă aceste ansambluri sînt formate din microparticule libere, atunci prin rezolvarea ecuațiilor Schrödinger referitoare la o microparticulă se vor găsi funcții de undă proprii uniparticulă $\psi_n(x_1)$, iar funcția de undă a sistemului va fi dată, în conformitate cu principiul de superpoziție, de o combinație liniară de astfel de funcții, de forma

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_N, t) = \sum_{n_1} \sum_{n_2} \dots \sum_{n_N} C(n_1, n_2, \dots, n_N, t) \cdot \psi_{n_1}(x_1) \dots \psi_{n_N}(x_N) \quad (9.4.11)$$

unde

$$C(n_1, n_2, \dots, n_N, t) = \int \psi(x_1, x_2, \dots, x_N, t) \psi_{n_1}^*(x_1) \dots \dots \psi_{n_N}^*(x_N) dx_1 \dots dx_N \quad (9.4.12)$$

Desigur, mărimea

$$w(n_1, n_2, \dots, n_N, t) = |C(n_1, \dots, n_N, t)|^2 \quad (9.4.13)$$

va juca rol de densitate de probabilitate de a găsi sistemul în starea cu numerele cuantice n_1, n_2, \dots, n_N . De exemplu, în cazul a două microparticule cu spinii semiîntregi, întrucît

$$\psi(x_1, x_2, t) = -\psi(x_2, x_1, t) \quad (9.4.14)$$

vom putea scrie

$$\sum_{n_1} \sum_{n_2} C(n_1, n_2, t) \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) = - \sum_{n_2} \sum_{n_1} C(n_2, n_1, t) \psi_{n_2}(x_1) \psi_{n_1}(x_2) \quad (9.4.15)$$

egalitate din care rezultă

$$C(n_1, n_2, t) = - C(n_2, n_1, t). \quad (9.4.16)$$

Se observă că pentru $n_1 = n_2$

$$C(n_1, n_1, t) = - C(n_1, n_1, t) = 0. \quad (9.4.17)$$

Acest rezultat ne arată că probabilitatea $w(n_1, n_1, t)$ de realizare a unei stări uniparticulă în care ambii fermioni să aibă aceleași numere cuantice este egală cu zero. O astfel de concluzie este cunoscută sub denumirea de *principiu de excluziune al lui Pauli* (Pauli a fost primul care a formulat acest principiu în legătură cu structura electronică a atomilor; vezi §10.3).

Funcția de undă pentru un sistem de doi fermioni se va putea scrie, cu (9.4.16), sub forma

$$\begin{aligned} \psi_a(x_1, x_2, t) &= \sum_{n_1 > n_2} \sum_{n_2} C(n_1, n_2, t) \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) + \\ &+ \sum_{n_1 < n_2} \sum_{n_2} C(n_1, n_2, t) \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) = \sum_{n_1 > n_2} \sum_{n_2} C(n_1, n_2) \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) + \\ &+ \sum_{n_2 < n_1} \sum_{n_1} C(n_2, n_1, t) \psi_{n_2}(x_1) \psi_{n_1}(x_2) = \sum_{n_1 > n_2} \sum_{n_2} C(n_1, n_2, t) [\psi_{n_1}(x_2) \psi_{n_2}(x_2) - \\ &- \psi_{n_2}(x_1) \psi_{n_1}(x_2)] \end{aligned} \quad (9.4.18)$$

sau

$$\psi_a(x_1, x_2, t) = \sum_{n_1} \sum_{n_2} C(n_1, n_2, t) \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(x_1) & \psi_{n_1}(x_2) \\ \psi_{n_2}(x_1) & \psi_{n_2}(x_2) \end{vmatrix}. \quad (9.4.19)$$

Atunci, pentru un sistem format din N fermioni liberi, funcția de undă se va exprima printr-un determinant de forma :

$$\psi_a(x_1, x_2, \dots, x_N, t) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(x_1) & \psi_{n_1}(x_2) & \dots & \psi_{n_1}(x_N) \\ \psi_{n_2}(x_1) & \psi_{n_2}(x_2) & \dots & \psi_{n_2}(x_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_{n_N}(x_1) & \psi_{n_N}(x_2) & \dots & \psi_{n_N}(x_N) \end{vmatrix} \quad (9.4.20)$$

denumit determinant Slater*.

De remarcă că fiecare coloană din acest determinant Slater descrie o stare uniparticulă a sistemului. Se observă că dacă se permută două astfel de microparticule, atunci funcția de undă ψ_a își schimbă semnul, întrucât o astfel de permutare implică o interschimbare a două dintre

* Constanta $(N!)^{-1/2}$ s-a obținut din condiția de normare a funcției ψ_a .

coloanele determinantului. În același timp, dacă doi fermioni se găsesc în aceeași stare, două dintre coloanele determinantului Slater vor deveni egale între ele, ceea ce atrage după sine anulară acestuia. Deci o astfel de stare nu se realizează.

În mod analog, pentru un sistem de bosoni se obține

$$\psi_s(x_1, x_2, \dots, x_N, t) = \sqrt{\frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_N!}} \prod_{i=1}^N \psi_{n_i}(x_i) \quad (9.4.21)$$

funcția ψ păstrându-și neschimbat semnul la o permutare a doi bosoni.

Să vedem în continuare cum se poate formula problema distribuției stărilor cuantice ale fermionilor și ale bosonilor, în condiții de echilibru termodinamic. Desigur, va fi avantajos ca și de astă dată să folosim spațiul fazic (μ), 6-dimensional, în care starea fiecărei microparticule este reprezentată printr-un punct figurativ. Împărțim acest spațiu în celule elementare, în așa fel încât fiecărei celule să-i corespundă o anumită stare cuantică și socotim numărul de microstări distincte, compatibile cu o stare termodinamică de echilibru, stabilind în câte moduri distincte pot fi populate aceste celule cu fermioni, respectiv cu bosoni.

Desigur, în cazul fermionilor va interveni restricția impusă de principiul de excluziune și anume, ca fiecare celulă să fie populată de cel mult un fermion (sau de niciunul), numărul de microstări distincte W_{termo} fiind determinat de permutările distincte între celulele populate și celulele goale. În cazul bosonilor vor interveni de asemenea microstări distincte numai atunci când permutările se fac între particule aparținând unor celule diferite, o celulă putând conține mai mulți bosoni identici nediscernabili.

Pentru a se înțelege de ce probabilitatea termodinamică W_{termo} are valori diferite în cazul distribuțiilor cuantice, față de cele din cazul distribuțiilor statistice clasice, să considerăm următorul exemplu ilustrativ: fie un stadion cu N locuri așezate pe g_i rînduri, fiecare rînd fiind ocupat de n_i spectatori. Dacă fiecare dintre spectatori se va deosebi de toți ceilalți prin câte un semn distinctiv (îmbrăcăminte, detaliu fizionomic etc.), atunci orice permutare între doi spectatori va conduce la o nouă distribuție a acestora, numărul total de moduri de rearanjare distinctă a spectatorilor corespunzînd distribuției clasice. În schimb, dacă toți spectatorii de pe un rînd ar fi identici (gemeni, de exemplu), atunci distribuția lor va rămîne neschimbată la permutarea între ei a doi spectatori de pe un același rînd și se va schimba numai dacă spectatorii de pe rînduri diferite schimbă locuri între ei. Desigur că în acest caz vor interveni mai multe permutări distincte, numărul acestora corespunzînd distribuției bosonilor. Dacă pe un rînd există un singur spectator sau nici unul, atunci situații distincte vor interveni numai la permutări ale spectatorilor pe rînduri goale, numărul corespunzînd distribuției fermionilor.

Problema calculării numărului de moduri distincte de aranjare a n_i bosoni pe g_i celule este similară problemei determinării în câte moduri distincte pot fi distribuite n_i mingi în $g_i > n_i$ cutii, fără a ține seama de numărul mingiilor dintr-o cutie. Vor exista $n_i + g_i$ mingi plus cutii și,

lăsând la o parte o cutie, restul de obiecte (mingi și cutii) pot fi permutate între ele de $(n_i + g_i - 1)!$ ori. Fixînd fiecare din aceste distribuții, atunci unei cutii îi vor reveni un anumit număr de mingi. Desigur, nu toate distribuțiile sînt distincte între ele, întrucît dacă se ia o minge dintr-o cutie și se plasează în oricare altă cutie, distribuția nu se va modifica. Vor exista $n_i!$ astfel de posibilități. Același lucru se poate face cu cele $g_i - 1$ cutii, existînd $(g_i - 1)!$ permutări nedistincte. De aceea, se poate scrie

$$n_i! (g_i - 1)! W_i = (n_i + g_i - 1)! \quad (9.4.22)$$

și deci

$$W_i = \frac{(n_i + g_i - 1)!}{n_i! (g_i - 1)!} \quad (9.4.23)$$

În cazul fermionilor, dacă la g_i celule corespund $n_i \leq g_i$ particule, înseamnă că $g_i - n_i$ dintre celule vor fi goale și n_i celule vor fi ocupate. Distribuții distincte apar numai la permutări între celule ocupate și celule goale, deci din numărul total de permutări $g_i!$ trebuie excluse $n_i!$ permutări între celule ocupate și $(g_i - n_i)!$ între celule goale. Atunci $n_i! (g_i - n_i)! W_i = g_i!$ și deci

$$W_i = \frac{g_i!}{n_i! (g_i - n_i)!} \quad (9.4.24)$$

Desigur, n_i și g_i se referă la un singur nivel energetic E_i . În cazul unui gaz de bosoni sau de fermioni, existînd mai multe astfel de nivele, numărul total de microstări va fi dat respectiv de

$$W_{\text{termo}}^{BE} = \prod_i \frac{(n_i + g_i - 1)!}{n_i! (g_i - 1)!}; \quad W_{\text{termo}}^{FD} = \prod_i \frac{g_i!}{n_i! (g_i - n_i)!} \quad (9.4.25)$$

Prin folosirea metodei multiplicatorilor lui Lagrange, respectiv prin înlocuirea expresiilor (9.4.25) în (9.1.7) și (9.1.8) se obțin, pentru distribuțiile cele mai probabile, corespunzătoare stărilor de echilibru termodinamic, expresiile

$$n_i^{BE} = \frac{g_i}{e^{\alpha + E_i/k_b T} - 1}; \quad n_i^{FD} = \frac{g_i}{e^{\alpha + E_i/k_b T} + 1} \quad (9.4.26)$$

Cu notația

$$\alpha = -\frac{\mu}{k_b T} \quad (9.4.27)$$

în care (așa cum rezultă din aplicarea consecventă a distribuțiilor Fermi și Bose la deducerea funcțiilor de stare termodinamice) μ joacă rol de potențial chimic (vezi și § 4.4), obținem

$$n_i^{BE} = \frac{g_i}{e^{\frac{E_i - \mu}{k_b T}} - 1}; \quad n_i^{FD} = \frac{g_i}{e^{\frac{E_i - \mu}{k_b T}} + 1} \quad (9.4.28)$$

Se observă că expresiile

$$p^{BE} = \langle n \rangle^{BE} = \frac{n_i^{BE}}{g_i} = \frac{1}{e^{\frac{E_i - \mu}{k_b T}} - 1} \quad (9.4.29)$$

$$p^{FD} = \langle n \rangle^{FD} = \frac{n_i^{FD}}{g_i} = \frac{1}{e^{\frac{E_i - \mu}{k_b T}} + 1} \quad (9.4.30)$$

reprezintă probabilitățile de populare ale nivelului E_i , la temperatura de echilibru T , cu bosoni, respectiv cu fermioni, formula (9.4.29) fiind cunoscută sub denumirea de distribuție *Bose-Einstein*, iar formula (9.4.30), de distribuție *Fermi-Dirac*. Aceste formule exprimă în același timp și numărul mediu $\langle n \rangle$ de bosoni, respectiv de fermioni, care populează, la echilibru termic, respectivele nivele energetice.

§ 9.5. MODELUL DE GAZ IDEAL CONSTITUIT DIN BOSONI, RESPECTIV DIN FERMIONI

Vom arăta în continuare cum se pot obține informații termodinamice pe baza rezultatelor de mai sus, în cazul unor sisteme formate din fermioni sau din bosoni liberi, aflate în condiții de echilibru termodinamic. În acest scop va trebui să deducem expresiile funcțiilor de stare termodinamice ale sistemului plecînd de la aceste distribuții statistice. Pentru entropia S a sistemului se obține, punînd $S = k_b \ln W_{termo}$, în aproximația formulei lui Stirling (9.1.10), cu (9.4.25) [103]

$$S = k_b \sum_i \left[g_i \frac{-\alpha + E_i/k_b T}{e^{-\alpha + E_i/k_b T} \mp 1} \mp \ln (1 \mp e^{-\alpha + E_i/k_b T}) \right] \quad (9.5.1)$$

Aici semnele de sus se referă la cazul bosonilor, iar cele de jos la cel al fermionilor.

De remarcat că formula (9.5.1) se poate scrie și sub forma

$$\begin{aligned} S &= -k_b \left[\alpha \sum_i \langle n \rangle - \frac{1}{k_b T} \sum_i \langle n \rangle E_i \pm \sum_i \ln (1 \mp e^{-\alpha + E_i/k_b T}) \right] = \\ &= -\frac{\mu N - U}{T} \pm k_b \sum_i \ln (1 \mp e^{-\alpha + E_i/k_b T}) \end{aligned} \quad (9.5.2)$$

unde prin N și U au fost notate numărul total de microparticule din sistem, respectiv energia internă a acestuia, date de expresiile

$$N = \sum_i \langle n \rangle = \sum_i \frac{g_i}{e^{-\alpha + E_i/k_b T} \mp 1} \quad (9.5.3)$$

și

$$U = \sum_i n_i E_i = \sum_i \frac{g_i E_i}{e^{-\alpha + E_i/k_b T} \mp 1}. \quad (9.5.4)$$

Avînd în vedere faptul că potrivit primului principiu al termodinamicii

$$U - TS - \mu N + p\mathcal{V} = 0 \quad (9.5.5)$$

din (9.5.2) rezultă ecuația

$$p\mathcal{V} = \mp \sum_i g_i \ln(1 \mp e^{\frac{E_i - \mu}{k_b T}}). \quad (9.5.6)$$

Aceasta este ecuația de stare a gazului ideal format din bosoni (semnul de sus), respectiv din fermioni (semnul de jos).

Dacă se ține seama de distribuția cu o anumită densitate $\rho(E)$ a stărilor energetice, atunci în aproximația unor variații evasicontinue de la o stare la alta, formulele de mai sus se vor putea scrie sub forma

$$U = \int_0^\infty E \rho(E) (e^{\frac{E - \mu}{k_b T}} \mp 1)^{-1} dE = \frac{2\pi g}{h^3} (2m_0)^{3/2} \int_0^\infty \frac{E^{3/2} dE}{e^{\frac{E - \mu}{k_b T}} \mp 1} \quad (9.5.7)$$

$$p\mathcal{V} = \frac{2\pi g}{h^3} (2m_0)^{3/2} \int_0^\infty \frac{(1 \mp e^{\frac{E - \mu}{k_b T}}) dE}{e^{\frac{E - \mu}{k_b T}} \mp 1}. \quad (9.5.8)$$

Se observă că

$$p\mathcal{V} = \frac{2}{3} U \quad (9.5.9)$$

respectiv, efectuînd integrarea în (9.5.7), în aproximația $e^{\mu/k_b T} \ll 1$,

$$p\mathcal{V} \simeq Nk_b T \left(1 \mp \frac{\pi^{3/2}}{2g} \frac{N\hbar^2}{\mathcal{V}(m_e T)^{3/2}} \right). \quad (9.5.10)$$

De remarcat că dacă

$$\frac{N}{\mathcal{V}} \left(\frac{\hbar^2}{m_e T} \right) \ll 1 \quad (9.5.11)$$

expresia (9.5.10) trece la forma clasică ($p\mathcal{V} = Nk_b T$) a legii gazelor perfecte. De aceea, se poate considera că inegalitatea (9.5.11) exprimă tocmai *condiția de valabilitate a mecanicii statistice clasice*.

Rezultatul (9.5.10) evidențiază faptul că în comportarea statistică a unui gaz intervin abateri însemnate de la legile statistice clasice mai ales la temperaturi scăzute ($T \rightarrow 0$ K), unde, de regulă, nivelele energetice sînt degenerate, iar condiția (9.5.11) nu mai este îndeplinită. Vom denumi

degenerat un astfel de gaz. Din expresia (9.5.10) rezultă că în cazul unui gaz de bosoni presiunea este mai mică decât a gazului ideal clasic, iar în cel fermionic este mai mare, ceea ce înseamnă că *efectele cuantice determină forțe de schimb atractive între electronii unui sistem fermionic degenerat*.

La temperaturi joase ($T \rightarrow 0$ K) un gaz ideal electronic este total degenerat, întrucât acești electroni populează toate nivelele energetice situate sub un anumit nivel E_F , numit — așa cum s-a precizat în § 8.8.4 — *nivel Fermi*.

Aceste nivele sînt dublu degenerate datorită spinului ($g_s = 2s + 1 = 2$). Într-adevăr, din (9.4.30) rezultă că pentru $T = 0$ K, $p^{FD} = 1$ dacă $E < \mu = E_F(0)$ și $p^{FD} = 0$ dacă $E > E_F(0)$. Prin urmare, popularea nivelelor se va face cu cîte 2 electroni (cu spinii inversați) pe fiecare subnivel, pînă la *nivelul Fermi* E_F , și vor rămîne nepopulate toate subnivelele situate deasupra lui E_F (fig. 9.5.1). Desigur că odată cu creșterea

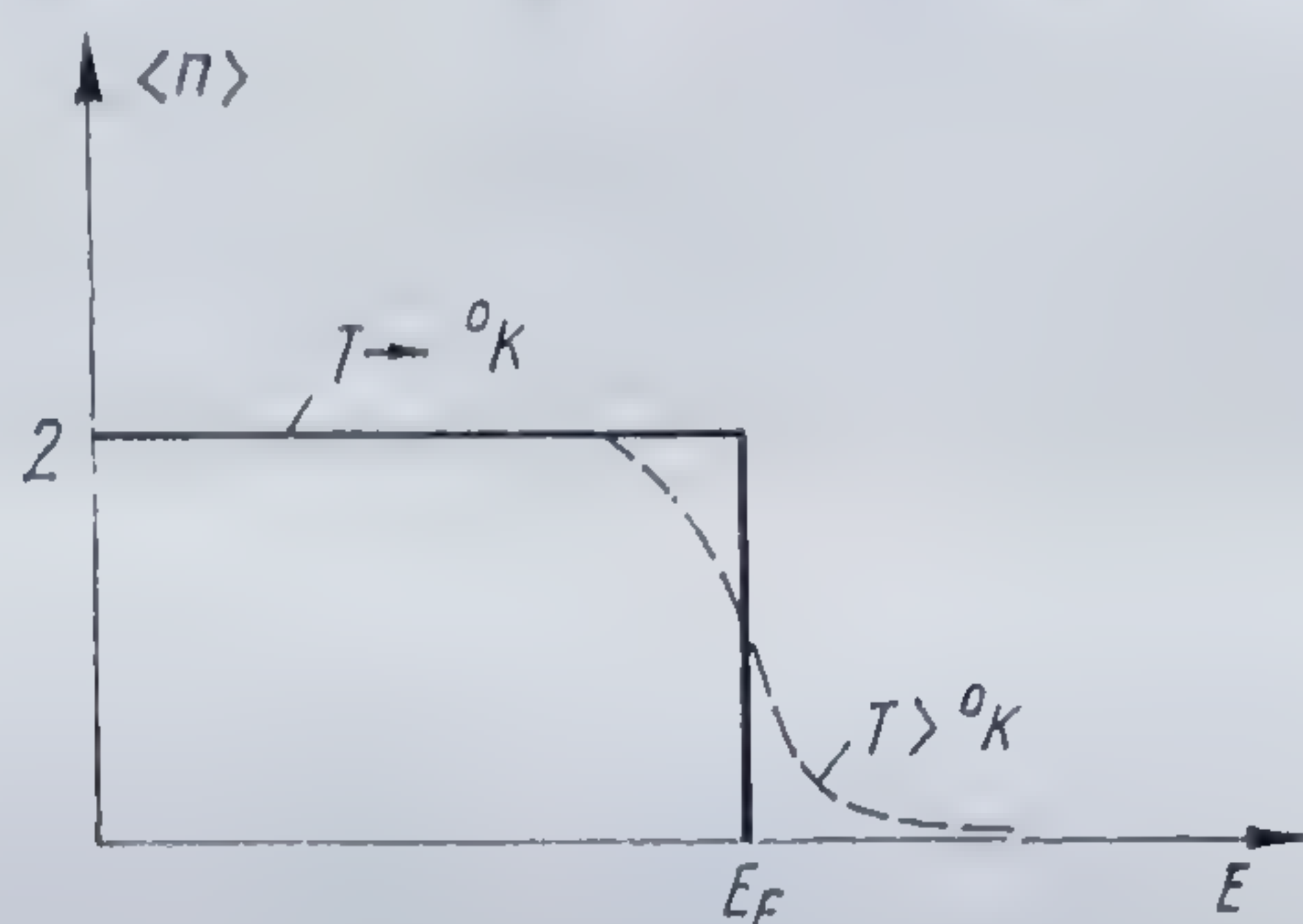


Fig. 9.5.1

lui T va începe popularea cu electroni și a subnivelelor cu $E > E_F$ în detrimentul celor cu $E < E_F$ (curba punctată în fig. (9.5.1)). Rezultă că energia nivelului Fermi va crește odată cu numărul total N de fermioni din sistem.

Într-adevăr, folosind expresia (8.8.32), vom putea scrie

$$N = \frac{4\pi\mathcal{V}g_s}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} k^2 dk = \frac{\mathcal{V}}{\pi^2} \frac{k_F^3}{3}$$

și deci

$$E_F(0) = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{N}{\mathcal{V}} \right)^{\frac{2}{3}}. \quad (9.5.12)$$

De remarcat că

$$E_F(0) = \mu \quad (9.5.13)$$

Atunci, pentru $T \geq 0$ K, se obține [58]

$$E_F(T) \simeq E_F(0) \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{E_F(0)} \right)^2 \right] \quad (9.5.14)$$

Cu cele de mai sus, legea de distribuție Fermi-Dirac se va scrie sub forma

$$p_{FD} = \frac{1}{e^{(E-E_F)/k_b T} + 1}. \quad (9.5.15)$$

Să aplicăm acest rezultat la studiul *emisiei termoelectronice* a unui metal, fenomen descoperit de Thomas Alva Edison în anul 1884. Electronii de conducție din metal populează, la 0K, subnivelele permise din cadrul benzii de conducție (pentru detalii vezi și § 11.4.4) pînă la nivelul Fermi, de energie E_F , dar ei nu pot ieși în afara metalului datorită barierei de potențial, de grosime infinită (fig. 9.5.2), care există la suprafața metalului. Vor putea ieși numai acei electroni a căror energie cinetică este mai mare decît

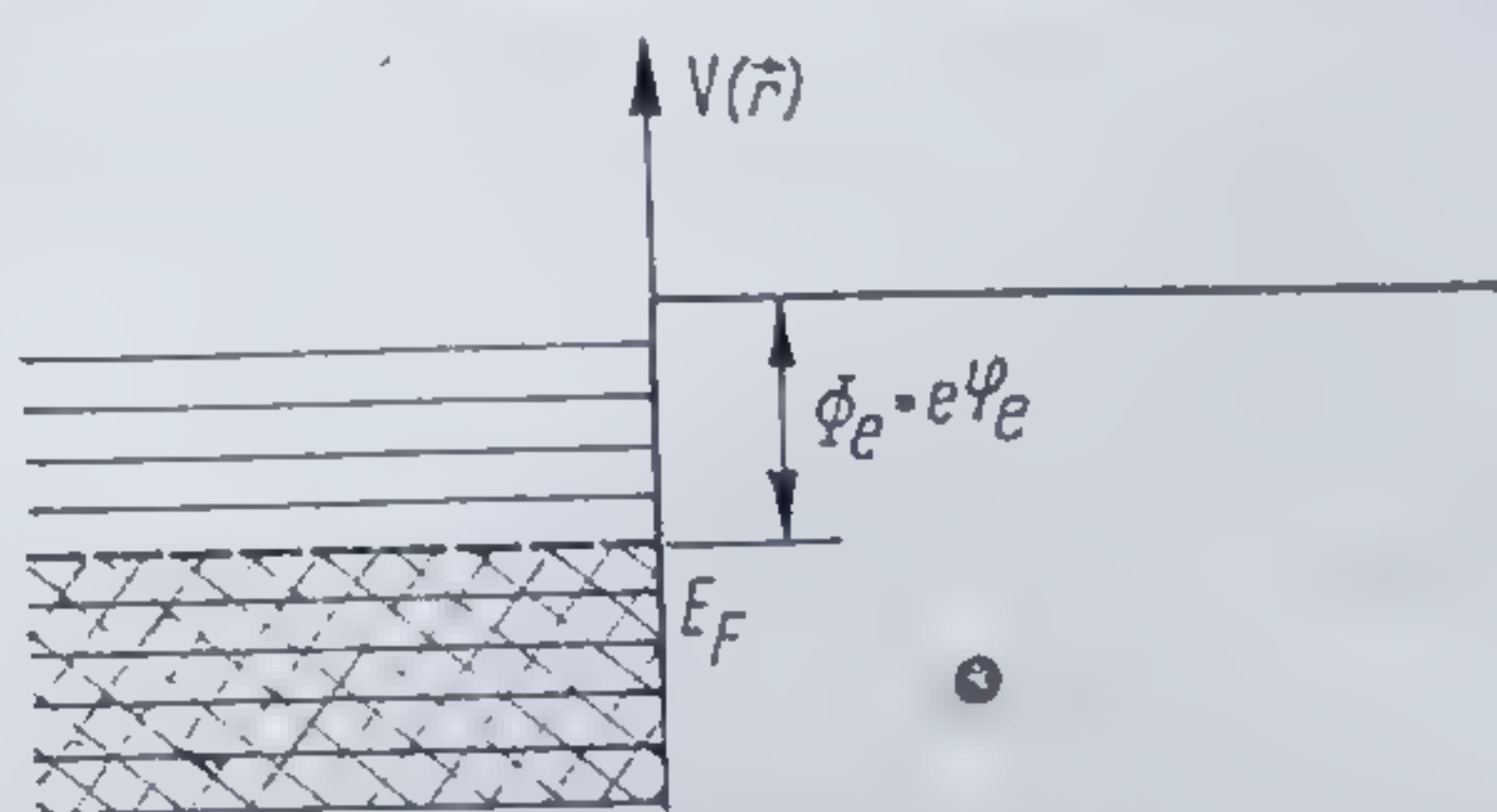


Fig. 9.5.2

energia de extracție Φ_e . Pentru electronii care se deplasează în lungul axei Ox , perpendiculară la suprafața metalului, aceasta înseamnă că $v_x \geq v_0$, unde $\frac{m_e v_0^2}{2} = e\phi_e$, ϕ_e fiind potențialul de extracție al unui electron din

metal. Numărul de electroni de conducție din unitatea de volum, cu vitezele cuprinse între v și $v + dv$, va fi dat, potrivit considerațiilor făcute în § 8.8.3, de

$$dn = \frac{\rho(E) p_{FD} dE}{4\pi v^2 dv} dv_x dv_y dv_z. \quad (9.5.16)$$

Folosind expresia lui $\rho(E)$, dată de (8.8.34), cu $g_s = 2$ și avînd în vedere că $E = m_e v^2/2$ și deci $4\pi v^2 dv = \frac{8\pi \sqrt{E} dE}{\sqrt{2} m_e^{3/2}}$, obținem pentru densitatea de curent emis în direcția Ox expresia

$$J_x = \int e v_x dn = 2e \left(\frac{m_e}{h} \right)^3 \int_{-\infty}^{\infty} dv_y \int_{-\infty}^{\infty} dv_z \int_{v_0}^{\infty} \frac{v_x dv_x}{1 + e^{(E-\mu)/k_b T}}. \quad (9.5.17)$$

În aproximația $(E - \mu) \ll k_b T$, luînd $[1 + e^{\frac{(E-\mu)}{k_b T}}]^{-1} \simeq e^{-\frac{(E-\mu)}{k_b T}}$ și efectuînd calculele în (9.5.17) se obține următoarea relație:

$$J = \frac{4\pi e m_e k_b^3}{h^3} T^2 e^{-e\phi_e/k_b T} = A T^2 e^{-\Phi_e/k_b T} \quad (9.5.18)$$

cunoscută sub denumirea de *legea lui Richardson*. Această lege este deosebit de importantă în studiul funcționării tuburilor electronice [53].

Rezultate la fel de interesante se obțin din *studiul statistic cuantic al gazelor ideale formate din bosoni*. În acest caz, plecând de la (9.5.3), cu (8.8.34) se obține

$$N = \int_0^{\infty} \frac{\rho(E) dE}{e^{\frac{E-\mu}{k_b T}} - 1} = \frac{2\pi}{h^3} (2m_e)^{3/2} g_s \int_0^{\infty} \frac{E^{1/2} dE}{e^{\frac{E-\mu}{k_b T}} - 1}. \quad (9.5.19)$$

Se observă că numărul N este pozitiv numai dacă $\mu < 1$ (altfel, pentru $E < \mu$, întrucît $\exp[(E - \mu)/k_b T] < 1$, s-ar obține $N < 0$, caz în care N își pierde semnificația fizică).

Se poate demonstra că odată cu creșterea temperaturii crește și μ , atingînd valoarea $\mu = 0$ la o anumită temperatură T_0 , determinată de condiția

$$N = \frac{2\pi\mathcal{V}}{h^3} (2m_e)^{3/2} g_s \int_0^{\infty} (e^{\frac{E}{k_b T}} - 1)^{-1} E^{\frac{1}{2}} dE \quad (9.5.20)$$

Schimbînd aici variabila E prin $t = E/k_b T$, în urma cîtorva calcule simple se obține

$$N = \frac{2\pi\mathcal{V}}{h^3} (2m_e k_b T)^{3/2} g_s \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{t} dt}{e^t - 1} \simeq 2,31 \frac{2\pi\mathcal{V} g_s}{h^3} (2m_e k_b T_0)^{3/2}. \quad (9.5.21)$$

Prin urmare, temperatura T_0 este dată de expresia

$$T_0 = \left(\frac{N h^3}{4,62 g_s \pi \mathcal{V}} \right)^{2/3} \frac{1}{2m_e k_b} \quad (9.5.22)$$

fiînd determinată, așa cum se poate observa, numai de numărul de bosoni $\left(n = \frac{N}{\mathcal{V}} \right)$ din unitatea de volum. Heliul este printre puținele elemente ale căror atomi sînt bosoni (2 electroni cu spini inversați și 4 nucleoni cu spini inversați, deci spin total nul). Pentru He lichid, a cărei densitate măsurabilă este $\rho_0 = 0,12 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$, deci $\frac{N}{\mathcal{V}} = \rho_0 \frac{N_A}{\mu} = 0,18 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$, re-

zultă $T_0 \simeq 2,8 \text{ K}$, valoare care corespunde destul de bine *punctului critic de tranziție a He în starea suprafluidă*, din starea lichidă normală.

Din cele expuse mai sus rezultă că la temperaturi sub T_0 , bosonii au $E = 0$ și $\mu < 0$. Evident că vor exista numai N_1 bosoni în stări cu $E > 0$ și $\mu = 0$, unde :

$$N_1 = \frac{2\pi\mathcal{V}}{h^3} (2m_0)^{3/2} g \int_0^{\infty} \sqrt{E} (e^{\frac{E}{k_b T}} - 1)^{-1} dE \quad (8.5.23)$$

expresie, care cu (9.5.22), se reduce la forma

$$N_1 = N \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\frac{3}{2}}. \quad (9.5.24)$$

Atunci numărul N_2 de bosoni aflați în stări cu $E = 0$ și $\mu < 0$ va fi dat de expresia

$$N_2 = N - N_1 = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\frac{3}{2}} \right]. \quad (9.5.25)$$

Se observă că, odată cu micșorarea temperaturii T spre 0 K, va crește N_2 , adică va crește numărul bosonilor a căror energie în starea fundamentală este nulă. Acest proces, care începe la temperatura de tranziție T_0 , a primit numele de *condensare Bose — Einstein*. În starea condensată comportarea bosonilor este total diferită de a celor aflați în stare normală. Starea de suprafluiditate a heliului lichid este asociată cu această stare condensată.

§ 9.6. RADIATIA TERMICĂ

În §7.2 s-a menționat că radiația electromagnetică emisă de corpurile încălzite este o radiație de echilibru termodinamic primind, de aceea, denumirea de *radiație termică*. Un astfel de echilibru intervine numai dacă corpurile încălzite, care emit sau absorb radiație termică, sînt corpuri absolut negre, absorbînd sau emițînd integral radiația termică. De aceea, radiațiile electromagnetice de acest fel se numesc adesea și *radiații de corp absolut negru*.

Din punct de vedere cuantic, o radiație de echilibru poate fi privită ca fiind constituită dintr-un ansamblu de fotoni distribuiți statistic. Fotonul fiind un corpuscul cu energia $h\omega$ și spinul zero, face parte din clasa bosonilor și de aceea un ansamblu de fotoni aflați în condiții de echilibru termodinamic, la $T \gg 0$ K, va fi descris statistic de legea de distribuție Bose-Einstein cu $\mu = 0$, adică

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{h\omega/k_b T} - 1}. \quad (9.6.1)$$

În acest caz, densitatea de stări $g(\omega) d\omega$, numită și *pondere statistică a stărilor*, ne va da numărul de stări ale fotonilor cu pulsațiile cuprinse în intervalul $d\omega$, respectiv numărul de fotoni ale căror ω sînt cuprinse în intervalul $d\omega$. Avînd în vedere că pentru fotoni $k = \omega/c$, din (8.8.32) se obține

$$\rho(\omega) d\omega = \frac{\mathcal{V} \omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3} \quad (9.6.2)$$

factorul 2 fiind introdus aici pentru a se ține seama de cele două stări de polarizare posibile ale unei unde transversale.

Rezultă că numărul dN_ω de fotoni care au pulsația cuprinsă în intervalul $d\omega$ va fi dat de expresia

$$dN_\omega = \langle n \rangle \rho(\omega) d\omega = \frac{\mathcal{V}}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^2 d\omega}{e^{h\omega/kbT} - 1}. \quad (9.6.3)$$

Acestor fotoni le va corespunde energia

$$dE_\omega = h\omega dN_\omega = \frac{\mathcal{V}h}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3 d\omega}{e^{h\omega/kbT} - 1} \quad (9.6.4)$$

Înlocuind aici $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$, se obține

$$dE_\lambda = \frac{16\pi^2 c h \mathcal{V}}{\lambda^5} \frac{d\lambda}{e^{\frac{2\pi h c}{k b T \lambda}} - 1}. \quad (9.6.5)$$

Radiația emisă de un corp absolut negru fiind o radiație total izotropă, poate fi caracterizată prin *puterea de emisie spectrală* r_λ^N (sau emitanța spectrală; vezi §7.2), definită prin relațiile (7.2.25) și (7.2.20), adică

$$r_\lambda^N = \frac{dM_\lambda}{d\lambda} = \frac{\pi dL_e}{d\lambda} = \frac{\pi c}{4\pi \mathcal{V}} \frac{dE_\lambda}{d\lambda} = \frac{8\pi^2 c h}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{2\pi h c / k b T \lambda} - 1} \quad (9.6.6)$$

care cu $c_1 = 8\pi c h \mathcal{V}$ și $c_2 = 2\pi h c / k_b$ este tocmai *legea lui Planck* (7.2.30) a radiației unui corp absolut negru.

Pentru *puterea de emisie integrală* $R(T)$ se va obține:

$$R(T) = \int_0^\infty r_\lambda^N d\lambda = \frac{\pi^2 k_b^2}{60 c^2 h^3} T^4 = \sigma T^4 \quad (9.6.7)$$

expresie identică cu *legea Stefan-Boltzmann* (7.3.31). De notat că legea (9.6.6) conține și expresia legii de deplasare a lui Wien (7.2.32) Valoarea λ_{max} corespunzătoare maximului din dependența $r_\lambda(T) = f(T, \lambda)$ (fig. 7.2.63) se va găsi din condiția

$$\left(\frac{dr_\lambda^N}{d\lambda} \right)_{\lambda_{max}} = c_1 \left[-5 \lambda_{max}^{-6} \frac{1}{e^{c_2/\lambda_{max}T} - 1} + \lambda_{max}^{-5} \frac{(c_2/\lambda_{max}^2 T) e^{\frac{c_2}{\lambda_{max}T}}}{(e^{c_2/\lambda_{max}T} - 1)^2} \right] = 0$$

Prin calcule simple rezultă

$$5 (e^{c_2/\lambda_{max}T} - 1) = \frac{c_2}{\lambda_{max}T} e^{\frac{c_2}{\lambda_{max}T}},$$

ecuație care admite o singură soluție pentru

$$\lambda_{max}T = 2,8978 \cdot 10^{-8} \text{ m} \cdot \text{K} \quad (9.6.8)$$

Aceasta este tocmai *legea de deplasare Wien*.

În aproximația lungimilor de undă mari, când se poate lua $\exp\left(\frac{c_2}{\lambda T}\right) \simeq 1 + \frac{c_2}{\lambda T}$, din (9.6.6) se regăsește formula *Rayleigh-Jeans* :

$$r_\lambda^N = \frac{8\pi^2 ch V}{\lambda^5} \frac{1}{1 + \frac{2\pi\hbar c}{k_b T \lambda}} = \frac{4\pi c}{\lambda^4} \cdot k_b T. \quad (9.6.9)$$

De asemenea, pentru lungimi de undă scurte, când $e^{c_2/\lambda T} \gg 1$, se va putea scrie

$$r_\lambda^N = c_1 \lambda^{-5} e^{-c_2/\lambda T} \quad (9.6.10)$$

care este *legea lui Wien*. Aceste legi, ale radiațiilor termice, oferă multiple aplicații, în pirometria optică și în alte domenii.

Uneori prezintă interes și cunoașterea ecuațiilor de stare ale unui sistem format din fotoni aflați în stare de echilibru termodinamic. Aceste ecuații se obțin ușor, urmînd calea expusă în paragraful precedent. Anume, se scriu funcțiile de stare termodinamice și din acestea se obține ecuația presiunii. De exemplu, dacă se ia $\mu = 0$, din (9.5.1) se obține

$$S = k_b \sum_i g_i \left[\frac{\hbar \omega / k_b T}{e^{\hbar \omega / k_b T} - 1} - \ln (1 - e^{-\hbar \omega / k_b T}) \right]. \quad (9.6.11)$$

Înlocuind pe g_i cu ponderea statistică (9.6.2), apoi schimbînd suma prin integrală și efectuînd integrarea se găsește

$$S = \frac{16}{3c} \mathcal{V} T^3 \quad (9.6.12)$$

În mod analog pentru energia internă U rezultă expresia

$$U = \int_0^\infty \hbar \mathcal{V} \rho(\omega) d\omega = \frac{\pi}{15} \frac{\mathcal{V} k_b^4}{c^3 \hbar^3} T^4 \quad (9.6.13)$$

deci

$$F = U - TS = -\frac{4\sigma}{3c} \mathcal{V} T^4. \quad (9.6.14)$$

Atunci

$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial \mathcal{V}}\right) = \frac{4\sigma}{3c} T^4 = \frac{U}{3\mathcal{V}} = \frac{\langle U \rangle}{3} \quad (9.6.15)$$

și deci

$$p\mathcal{V} = \frac{U}{3} \quad \text{și} \quad p = \frac{\langle u \rangle}{3}. \quad (9.6.16)$$

Elemente de fizică atomică și moleculară

§ 10.1. INTRODUCERE

Studiile asupra atomului și moleculei reprezintă domenii dintre cele mai importante ale fizicii moderne. Ele cuprind o problemă vastă, legată de structura discontinuă a substanțelor, precum și concluzii de interes științific și practic ce derivă din această structură.

După cum se știe, atomistica a apărut în antichitatea greacă, fiind cultivată mai ales de către Democrit (460 — 370 î.e.n.), care considera că „materia, concepută ca totalitatea lucrurilor despre a căror existență ne dăm seama prin simțuri, este constituită din particule mici și indivizibile, care se deosebesc între ele prin formă, poziție și aranjament. Între aceste particule indivizibile, denumite atomi, există vid. Atomii se mișcă în vid și ciocnindu-se între ei produc vârtejuri, dau naștere la combinații din care rezultă corpurile”.

Despre toate acestea știm de la Aristotel (384 — 322 î.e.n.), care face referiri la doctrina lui Democrit. Este posibil însă că pentru Democrit ideea de atom să fi constituit mai mult un suport filozofic în susținerea concepției sale potrivit căreia, în diviziunea unui obiect în părți din ce în ce mai mici, trebuie să ne oprim la o particulă ultimă, indivizibilă. Altfel, prin divizarea la infinit a obiectului „s-ar ajunge la nimic și din nimic nu se poate constitui ceva” spunea Democrit.

Cu toate că doctrina atomistică a fost bine cunoscută în antichitate, fiind cîntată de Titus Lucretius Carus (95 — 52 î.e.n.) în celebrul său poem „De rerum natura”, ulterior ideea atomistică a fost abandonată, pentru a reapare abia prin anul 1738, cînd Daniel Bernoulli face prima încercare de a elabora o teorie cinetico-moleculară.

Conceptele moderne, de atom și de moleculă, sînt create de către chimiștii secolului XIX. Astfel, Dalton ajunge la concluzia că atomii sînt specifici elementelor chimice, iar moleculele — substanțelor compuse. În anul 1808 el definește *masa atomică relativă*, prin raportarea masei atomilor la masa hidrogenului. Ulterior, determinarea din ce în ce mai precisă a acestor mase a jucat un rol deosebit în dezvoltarea atomisticii, culminînd

cu descoperirea, în anul 1869 de către Mendeleev, a *legii periodicității*. În anul 1886, W. Crooks explică masele atomice fracționare prin existența unor specii atomice diferite care intră în anumite proporții în constituția elementelor chimice; aceasta a determinat descoperirea *izotopilor* — specii atomice cu proprietăți chimice foarte apropiate, dar cu proprietăți fizice distincte.

Trebuie notat că, concomitent cu dezvoltarea teoriei cinetico-moleculare, ideea de discontinuitate pătrunde și în electricitate. În anul 1834 este introdus numărul Faraday, $F = 96520 \text{ C/mol}$, pentru a exprima sarcina electrică purtată de un mol de ioni monovalenți într-o soluție de electrolit. Pe baza acestui număr se poate defini sarcina elementară, $e = F/N_A = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ care ulterior, în anul 1913, a fost determinată printr-un experiment direct, efectuat de către Millikan. Studiul razelor catodice îl conduce pe J. Stoney să introducă, în anul 1890, noțiunea de *electron* pentru purtătorii de sarcină elementară negativă și de *proton* pentru cei de sarcină pozitivă — particule elementare ce intră în constituția atomilor și a moleculelor.

Astăzi, atomul și molecula sînt concepute ca particule ultime care mai păstrează proprietățile fizice, respectiv pe cele chimice ale unei anumite substanțe. Atomii și moleculele, deși sînt neutre din punct de vedere electric, au o structură complexă în care intră electroni, protoni și neutroni cu comportament specific cuantic.

Se știe că pe baza experimentelor de difuzie a particulelor α , Rutherford formulează, în anul 1911, *modelul planetar al atomului*, potrivit căruia electronii gravitează în jurul unui nucleu încărcat electric pozitiv sub acțiunea unor forțe de atracție coulombiene. De notat că deși ulterior această imagine clasică despre atom, analogă sistemului planetar solar (vezi § 1.8 și § 6.10.2), s-a dovedit a fi nesatisfăcătoare, ideea că electronii din atomi și molecule se găsesc într-un câmp atractiv coulombian, generat de nuclee, și-a păstrat valabilitatea chiar și în teoriile cuantice relativiste. Interacția coulombiană și în general interacția electromagnetică, fiind o interacție cu rază lungă de acțiune, pe deplin cunoscută (vezi § 12.10.4), a permis abordarea și rezolvarea tuturor problemelor legate de comportamentul cuantic al electronilor în câmpul coulombian al nucleelor atomice. În felul acesta s-a ajuns la cunoașterea multiplelor aspecte legate de structura electronică a atomilor și moleculelor. Studiul acestor structuri și explicarea pe baza lor a imensei varietăți de proprietăți fizico-chimice ale substanțelor constituie la ora actuală obiectul fizicii atomice și fizicii moleculare moderne [9, 89, 113, 116, 132, 133]. În continuare vor fi expuse elementele de bază ale unui astfel de studiu.

§ 10.2. ATOMUL HIDROGENOID

Unul dintre modelele simple de atom, pentru care se poate elabora o teorie cuantică completă, este cel al *atomului hidrogenoid*, constituit dintr-un nucleu fix, încărcat cu Z sarcini elementare pozitive și un singur

electron de valență e^- (fig. 10.2.1). În cele ce urmează vom neglija, pentru început, efectele relativiste, inclusiv spinul electronic și vom presupune că atomul se găsește într-o stare cuantică staționară, descrisă de o ecuație Schrödinger independentă de timp, de forma

$$\Delta\psi(r, \theta, \varphi) + \frac{2m_e}{\hbar^2} [E - V(r)] \psi(r, \theta, \varphi) = 0. \quad (10.2.1)$$

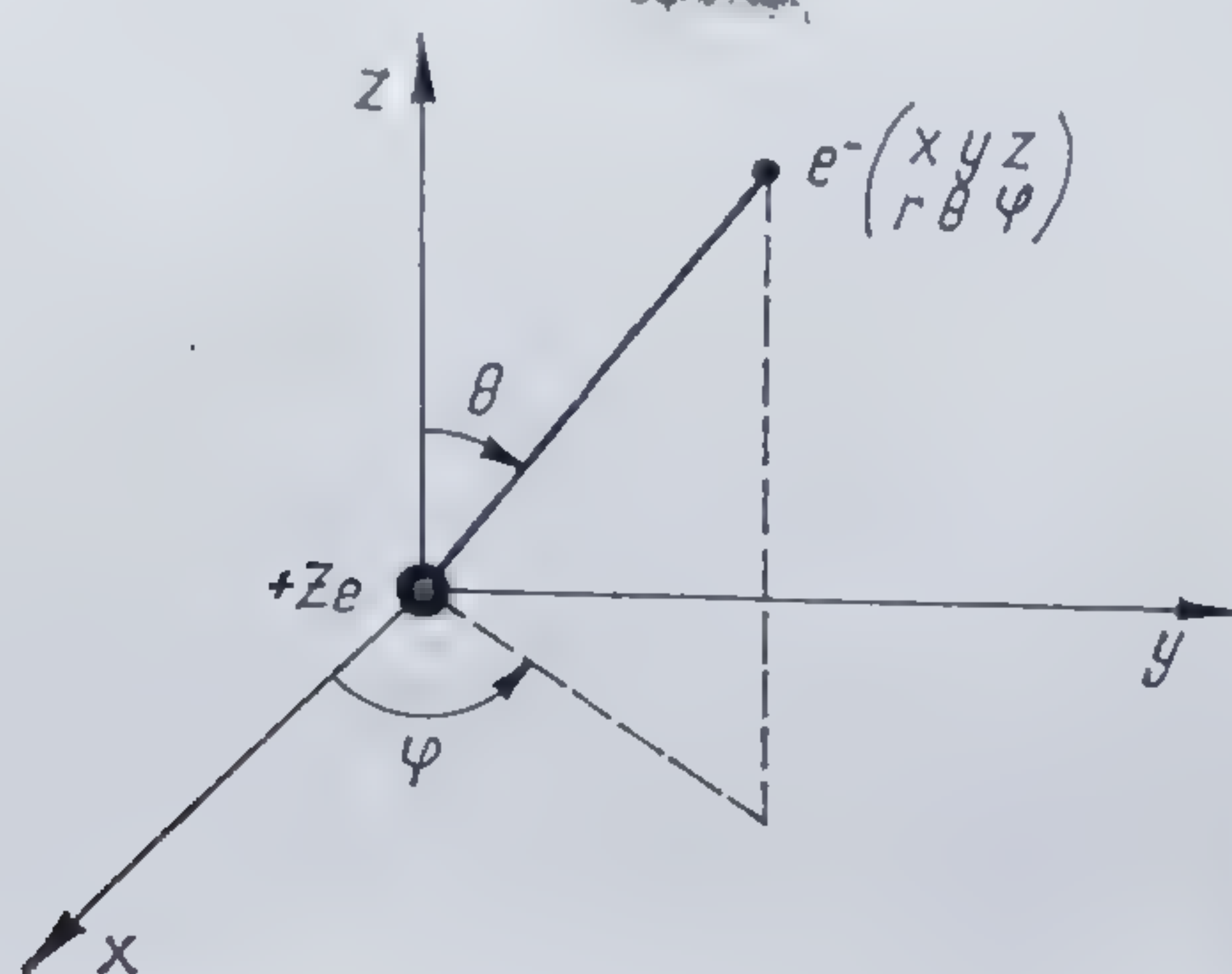


Fig. 10.2.1

Aici prin $V(r)$ s-a notat energia potențială a electronului în câmpul coulombian al nucleului, adică

$$V(r) = \int \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} dr = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (10.2.2)$$

iar prin Δ operatorul laplaceian în coordonate sferice

$$\Delta = \Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta\varphi} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (10.2.3)$$

Introducând notațiile

$$k^2 = -\frac{2m_e E}{\hbar^2}, \quad \beta = \frac{m_e Z e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \quad (10.2.4)$$

ecuația (10.2.1) ia forma

$$\left(\Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta\varphi} \right) \psi(r, \theta, \varphi) + \left(-k^2 + \frac{2\beta}{r} \right) \psi(r, \theta, \varphi) = 0. \quad (10.2.5)$$

Vom căuta pentru această ecuație o soluție $\psi(r, \theta, \varphi)$, folosind metoda separării variabilelor, respectiv vom admite că mișcarea radială a electronului, descrisă de o funcție de undă radială $R(r)$, se face independent de mișcarea sferică, descrisă de o funcție de undă sferică $Y(\theta, \varphi)$. Atunci, luând

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi) \quad (10.2.6)$$

în ecuația (10.2.5) se vor separa variabilele și vom obține

$$\frac{r^2 \Delta_r R(r)}{R(r)} + \left(-k^2 + \frac{2\beta}{r} \right) r^2 = - \frac{\Delta_{\theta\varphi} Y(\theta, \varphi)}{Y(\theta, \varphi)}. \quad (10.2.7)$$

Dar în această egalitate membrul întâi este funcție numai de r , iar membrul al doilea numai de θ și φ și, de aceea, putem egala pe fiecare cu o constantă λ . Se vor obține astfel următoarele două ecuații

$$\Delta_r R(r) + \left(-k^2 + \frac{2\beta}{r} - \frac{\lambda}{r^2} \right) R(r) = 0 \quad (10.2.8)$$

$$\Delta_{\theta\varphi} Y(\theta, \varphi) + \lambda Y(\theta, \varphi) = 0. \quad (10.2.9)$$

În §8.8.7 s-a arătat că $-\hbar^2 \Delta_{\theta\varphi} = \hat{L}^2$, \hat{L}^2 fiind operatorul moment cinetic orbital la pătrat, ale cărui valori proprii sînt date de expresia (8.8.136). De aceea, avem

$$\lambda^2 = \hbar^2 l(l+1) \quad (10.2.10)$$

înjucînd aici rol de *număr cuantic orbital*. Cu (10.2.10), ecuațiile (10.2.8) și (10.2.9) primesc forma

$$\Delta_r R(r) + \left(-k^2 + \frac{2\beta}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2} \right) R(r) = 0 \quad (10.2.11)$$

$$\Delta_{\theta\varphi} Y(\theta, \varphi) + l(l+1) Y(\theta, \varphi) = 0. \quad (10.2.12)$$

Pentru aflarea soluțiilor acestor ecuații vom analiza mai întâi cazul particular $l = 0$, care corespunde unei simetrii radiale ($\Delta_{\theta\varphi} = 0$).

a) *Starea cu $l = 0$ (starea simetrică)*: Experiențele pun în evidență existența reală a unor stări atomice cu $l = 0$, denumite *stări simetrice* sau *stări de tip s*. Ele se întîlnesc la atomii elementelor alealine, respectiv la ai gazelor nobile, aflați în stări fundamentale și pot fi descrise prin funcții de undă radiale $R(r)$, generate de ecuația

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left(-k^2 + \frac{2\beta}{r} \right) R = 0 \quad (10.2.13)$$

Vom căuta pentru această ecuație o soluție de forma

$$R(r) = \frac{1}{r} U(r) \quad (10.2.14)$$

care introdusă în ecuația (10.2.13) conduce la ecuația

$$\frac{d^2 U}{dr^2} + \frac{2\beta}{r} U = k^2 U \quad (10.2.15)$$

Se observă că pentru $r \rightarrow \infty$ această ecuație se reduce la forma

$$\frac{d^2 U_\infty}{dr^2} - k^2 U_\infty = 0 \quad (10.2.16)$$

și are ca soluție asimptotică funcția

$$U_\infty(r) = A e^{-kr} + B e^{kr} = A e^{-kr} \quad (10.2.17)$$

în care constanta B s-a luat zero, întrucât $U_\infty(r)$ trebuie să rămână finită la $r \rightarrow \infty$, în virtutea condițiilor standard (8.5.26).

Căutând, în continuare, pentru ecuația (10.2.15) o soluție de forma

$$U(r) = A e^{-kr} f(r) \quad (10.2.18)$$

atunci pentru noua funcție $f(r)$ se va obține ecuația :

$$\frac{d^2 f(r)}{dr^2} - 2k \frac{df(r)}{dr} + \frac{\beta}{r} f(r) = 0. \quad (10.2.19)$$

Căutăm și pentru această ecuație o soluție de forma unui polinom

$$f(r) = \sum_{m=1}^N a_m r^m \quad (10.2.20)$$

Prin introducerea acestei expresii în (10.2.19) se obține

$$\sum_m a_m m(m+1) r^{m-2} - 2k \sum_m a_m m r^{m-1} + \beta \sum_m a_m r^{m-1} = 0$$

condiție îndeplinită numai dacă coeficienții lui r la diverse puteri sînt nuli. Din anularea coeficientului lui r^{n-1} , rezultă

$$a_{n+1} = a_n \frac{2kn - \beta}{n(n+1)}. \quad (10.2.21)$$

Dar funcția de undă $R(r)$ trebuie să fie finită și, de aceea, termenii polinomului (10.2.20) vor trebui să fie descrescători și să se anuleze de la un anumit ordin în sus. De exemplu, dacă $a_{n+1} = 0$, atunci din formula (10.2.21) rezultă

$$\beta = 2kn; \quad n = 1, 2, \dots \quad (10.2.22)$$

Înlocuind aici pe β și k din (10.2.4) se obține

$$E_n = - \frac{m_e Z^2 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}; \quad n = 1, 2, \dots \quad (10.2.23)$$

Această expresie ne arată că energia electronului hidrogenoid este cuantificată, n jucînd rol de *număr cuantă principal*.

Faptul că starea energetică a electronului din atom este cuantificată are o însemnătate deosebită pentru studiul fenomenelor atomice. Scriind expresia (10.2.23) sub forma

$$E_n = -AZ^2 \frac{1}{n^2}; \quad n = 1, 2, \dots \quad (10.2.24)$$

în care s-a notat prin $A = \frac{1}{2} m_e c^2 \alpha^2$, α fiind o constantă adimensională, dată de expresia :

$$\alpha = \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0) \hbar c} = \frac{1}{137} \quad (10.2.25)$$

și numită *constantă a structurii fine* și observînd că $A = 13,6$ eV se va putea scrie (pentru atomul de hidrogen, $Z = 1$) :

$$E_n = -13,6 \frac{1}{n^2} [\text{eV}]; \quad n = 1, 2, \dots \quad (10.2.26)$$

Se constată astfel că nivelele energetice ale electronului din atomul de hidrogen sînt cu atît mai apropiate între ele cu cît numărul cuantic principal n este mai mare (fig. 10.2.2). Pentru $n \rightarrow \infty$, rezultă $E \rightarrow 0$, iar pentru $E > 0$, energia electronului este necuantificată. Desigur, valorile pozitive ale energiei corespund stărilor electronice nelegate de nucleu. Dacă electronului, situat pe nivelul de energie minimă E (în starea fundamentală), i se transferă din exterior energia $E_i = 13,6$ eV, atunci el se va desprinde de nucleu, devenind liber. Un astfel de proces se numește *ionizare*, $E_i = 13,6$ eV fiind *energia de ionizare* a atomului de hidrogen, rezultat în deplină concordanță cu datele experimentale.

Saltul electronului pe nivele energetice superioare poate fi produs, fie prin absorbție de energie radiantă, fie prin intermediul ciocnirilor cu alte microparticule (îndeosebi cu electroni). Aceste salturi conduc la *stări excitate*, din care atomul poate reveni la starea fundamentală, sau la o stare de energie mai scăzută, prin emisie de cuante de radiație. Energia unei astfel de cuante este dată de expresia

$$h\nu = E_m - E_n. \quad (10.2.27)$$

De observat că această relație conduce imediat la formula seriilor spectrale (8.3.40), dacă pentru E_m și E_n se folosesc expresii de forma (10.2.24)

Existența nivelelor de energie cuantificate ale atomului a fost pusă în evidență printr-o experiență, rămasă celebră, pe care au conceput-o și realizat-o, în anul 1913, Frank și Hertz. Într-un tub electronic vidat T (fig. 10.2.3, a), prevăzut cu un filament F , un anod A și o grilă G se introduc vapori de Hg și se înregistrează o caracteristică voltamperică $I_a = f(U_a)$ în condiții în care potențialul U_g al grilei G este ceva mai mare decît potențialul anodic U_a , deci cînd între grilă și anod se realizează un ușor cîmp de frînare a electronilor emiși de filament. În aceste condiții se obține o

curbă de forma celei prezentate în diagrama din fig. 10.2.3, b, care pune în evidență maxime distanțate între ele cu 4,9 V. S-a constatat că aceste maxime corespund tocmai primei trepte de excitare a ionilor de Hg, ceea ce înseamnă că prin ciocniri electronii nu pot ceda ionilor de Hg decât energia de 4,6 eV, necesară pentru ca aceștia să sară pe primul nivel cuantic, altfel ciocnirea este perfect elastică. Desigur că după fiecare ciocnire cu transfer de energie, electronii nu vor mai reuși să străbată

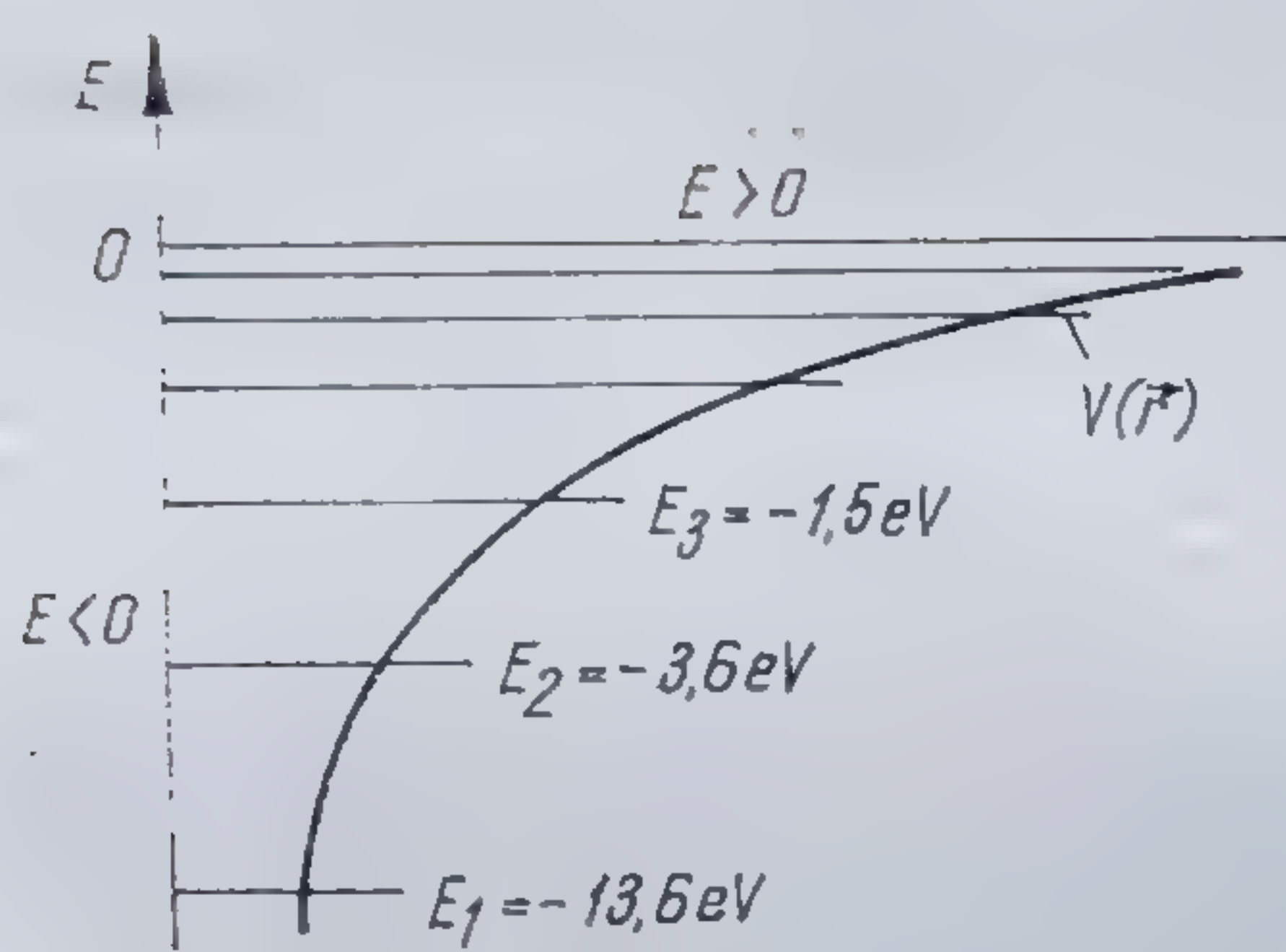


Fig. 10.2.2

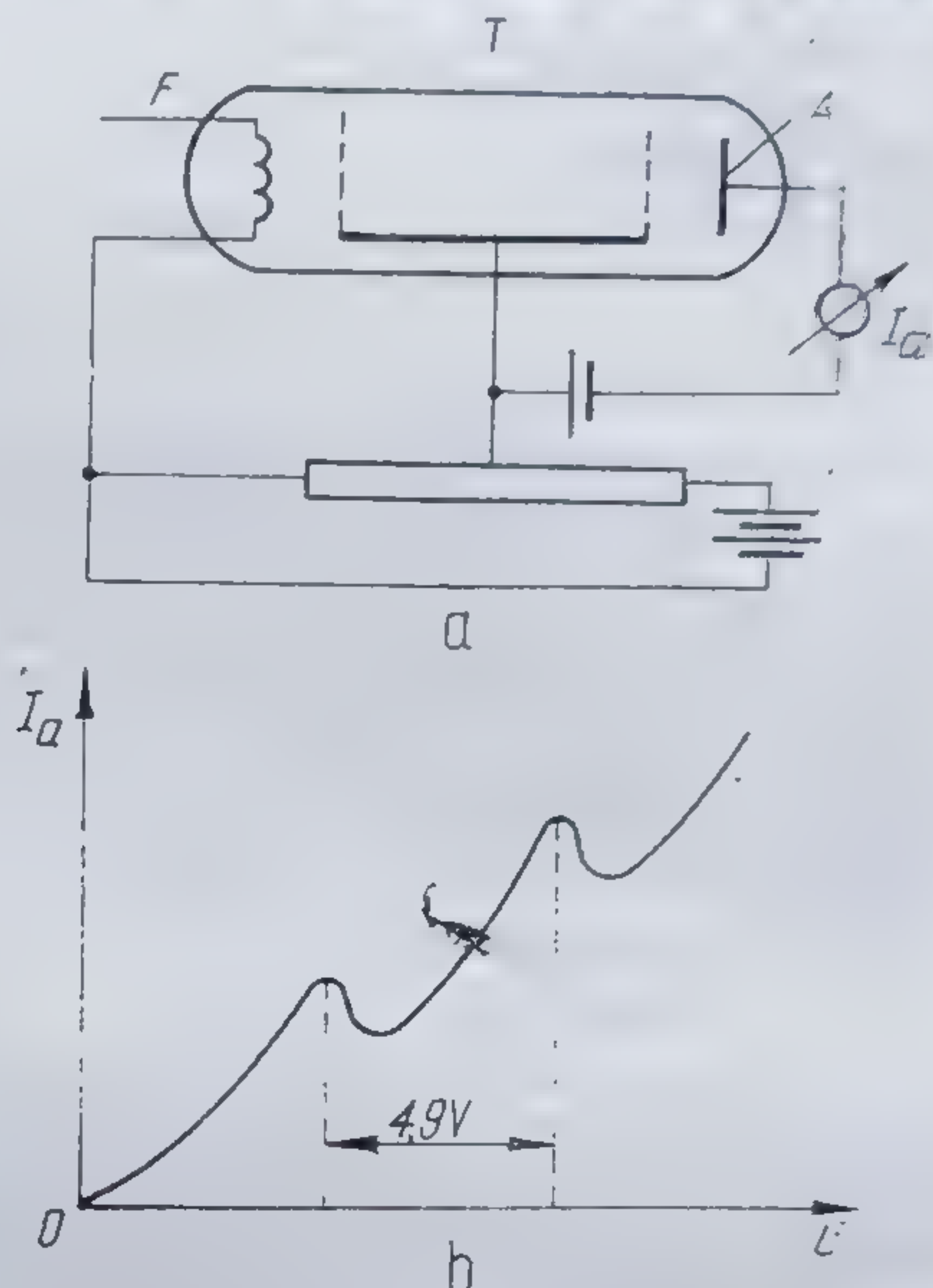


Fig. 10.2.3

cîmpul de frînare dintre grilă și anod și, fiind captați de grilă, va apare o micșorare a curentului anodic I_a .

Revenind la problema generală a descrierii stărilor staționare ale unui atom hidrogenoid, trebuie notat că starea cu $l = 0$ se numește și *stare de tip s*, întrucît funcția de undă ψ care descrie o astfel de stare, prezintă o simetrie radială, de forma

$$\psi(r) = \psi_0 \frac{e^{-kr}}{r} \sum_{n=1}^N a_n r^n. \quad (10.2.28)$$

Desigur și probabilitatea de localizare a electronilor într-o astfel de stare va prezenta o simetrie sferică, deoarece

$$dW = |\psi|^2 dV = \left| \psi_0 \frac{e^{-kr}}{r} \sum_n a_n r^n \right|^2 4\pi r^2 dr. \quad (10.2.29)$$

Se observă că pentru $n = 1$, cînd potrivit relației (10.2.22) $k_1 = \frac{\beta}{2} = \frac{Z\alpha}{\Lambda_0}$ (Λ_0 — fiind lungimea de undă Compton (8.2.19) a electronului); distribuția radială a probabilității de localizare a electronului

va avea valoarea maximă la o distanță $r = r_B$ de nucleu, pentru care $w = \frac{dW}{dr} = 4\pi r^2 a_1^2 \exp[-2k_1 r]$ va fi maximă, deci

$$\left(\frac{dw}{dr}\right)_{r=r_B} = 4\pi a_1^2 \cdot (2r_B e^{-2k_1 r_B} - k_1 r_B^2 e^{-1k_1 r_B}) = 0$$

din care rezultă

$$r_B = \frac{\Lambda_0}{\alpha} = 0,51 \text{ \AA}. \quad (10.2.30)$$

Această valoare reprezintă tocmai *raza primei orbite Bohr* din atomul de hidrogen. Avînd în vedere că poziția electronului este descrisă statistic, vechea imagine clasică a orbitelor electronice nu va mai putea fi menționată. În locul ei s-a introdus noțiunea de *orbital atomic*, care exprimă geometric distribuția densității de probabilitate de localizare a electronilor în atom. Uneori, orbitalul atomic este definit ca locul geometric al punctelor cu densitate electronică egală cu 0,9 din cea maximă, dar adesea prin orbital atomic se înțelege însăși funcția de undă corespunzătoare electronului atomic. Prin urmare, orbitalul atomic corespunzător stării cu $n = 1$ este un *orbital simetric de tip s*.

b) *Stări cuantice cu $l \neq 0$ ale atomului hidrogenoid*. Studiul acestor stări prezintă o complexitate sporită datorită faptului că el presupune rezolvarea unei ecuații de tipul (10.2.11). Vom rescrie respectiva ecuație sub forma

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left[E - \left(-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} \right) \right] R(r) = 0. \quad (10.2.31)$$

Se observă că această ecuație conține o energie potențială efectivă

$$V_{ef}(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} \quad (10.2.32)$$

formată dintr-un termen coulombian atractiv și dintr-un termen orbital repulsiv, în așa fel încît independența energiei potențiale efective de distanța r a electronului față de nucleu va interveni o groapă de potențial, de forma celei reprezentată în fig. 10.2.4. Desigur, în acest caz, stările cuantificate vor fi stări legate, pentru care $E < 0$, iar cele necuantificate vor corespunde stărilor nelegate, pentru care $E > 0$.

Pentru calcularea valorilor medii ale razelor orbitalilor atomici se va folosi expresia

$$r_n = \langle r \rangle = \int \psi^* \hat{r} \psi d\mathcal{V} \quad (10.2.33)$$

în care $\psi(r) = R(r)$ este soluția ecuației (10.2.31). De observat că prin schimbarea de funcție

$$R(r) = \frac{1}{r} \chi(r) \quad (10.2.34)$$

această ecuație devine

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left[E - \left(-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \right] \chi = 0. \quad (10.2.35)$$

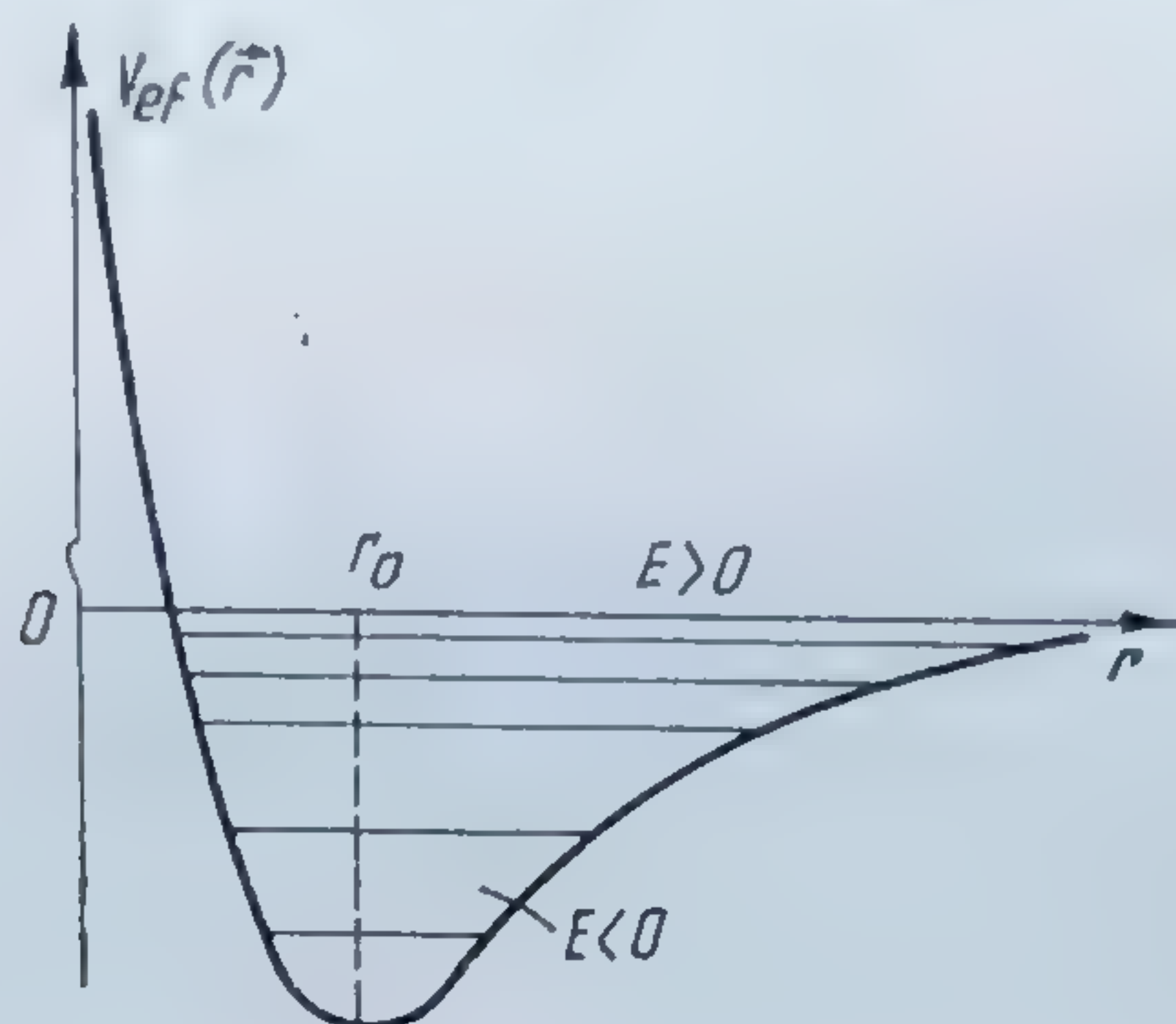


Fig. 10.2.4

În aproximația $r \rightarrow 0$, ecuația (10.2.35) se reduce la forma

$$\frac{d^2\chi_0}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \chi_0 = 0 \quad (10.2.36)$$

și are soluția* :

$$\chi_0(r) = A r^{l+1} \quad (10.2.37)$$

iar în aproximația $r \rightarrow \infty$, ecuația (10.2.35) se reduce la forma

$$\frac{d^2\chi_\infty}{dr^2} + \frac{2m_e E}{\hbar^2} \chi_\infty = 0 \quad (10.2.38)$$

și are soluția asimptotică

$$\chi_\infty(r) = B e^{-\sqrt{\frac{2m_e |E|}{\hbar^2}} r}, \quad \text{cu } |E| = -E. \quad (10.2.39)$$

Atunci, pentru $0 < r < \infty$, avînd în vedere că făcînd schimbarea de variabilă

$$\xi = \frac{m_e e^2}{\hbar^2} r = \frac{r}{r_B}, \quad \text{și } \epsilon = \frac{\hbar^2 |E|}{m_e e^4} \quad (10.2.40)$$

ecuația (10.2.35) devine

$$\frac{d^2\chi}{d\xi^2} - \frac{l(l+1)}{\xi^2} \chi + 2 \left(\epsilon - \frac{Z}{\xi} \right) \chi = 0 \quad (10.2.41)$$

* Mai este posibilă și soluția $\chi'_0 = B r^{-l}$, care se înlătură, deoarece aceasta nu este finită în $r = 0$.

vom căuta, pentru această ecuație, o soluție de forma :

$$\chi(\xi) = C \chi_0 \chi_\infty \sum_{n_r} b_{n_r} \xi^{n_r} = C e^{-\xi \sqrt{2\epsilon}} \sum_{n_r} b_{n_r} \xi^{n_r+l+1} \quad (10.2.42)$$

Proceedind și aici ca în cazul $l = 0$, adică introducînd expresia (10.2.42) în (10.2.41), prin anularea coeficientului termenului în ξ^{n_r+l+1} , se va obține o formulă de recurență pentru coeficienții b_{n_r} de forma

$$b_{n_r+1} = b_{n_r} \frac{2[Z - (n_r + l + 1) \sqrt{2\epsilon}]}{l(l+1) - (n_r + l + 1)(n_r + l + 2)} \quad (10.2.43)$$

Impunînd condiția ca seria (10.2.42) să aibă termeni nuli, începînd cu cel de ordin $n_r + 1$, deci $b_{n_r+1} = 0$, se va obține $Z = (n_r + l + 1) \sqrt{2\epsilon}$, respectiv cu notațiile (10.2.40)

$$E_n = - \frac{m_e Z^2 e^4}{32 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}; \quad n = n_r + l + 1 = 1, 2, \dots \quad (10.2.44)$$

De notat că numărul cuantic n_r poartă numele de *număr cuantic radial*, n -fiind *numărul cuantic principal*.

Se observă că numărul cuantic orbital l va putea parcurge valorile

$$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1. \quad (10.2.54)$$

Cu rezultatele de mai sus, funcția de undă radială $R(r)$ se exprimă sub forma

$$R_{nl}(r) = N_{nl} e^{-\frac{1}{2}\xi} \cdot \zeta^l L_{n+l}^{2l+1}(\zeta) \quad (10.2.46)$$

unde s-a folosit notația $\zeta = \frac{2Z}{n} \xi$, iar prin $L_{n+l}^{2l+1}(\zeta)$ s-au notat expresiile

$$L_{n+l}^{2l+1}(\zeta) = e^{\zeta} \frac{d^{2l+1}}{d\zeta^{n+l}} \left[\frac{d^{n+l}}{d\zeta^{2l+1}} \right] (e^{-\zeta} \cdot \zeta^{n+l}) \quad (10.2.47)$$

numite polinoame Laguerre [65], N_{nl} fiind norma acestor funcții proprii ce se determină din condiția de normare $\int_0^\infty R_{nl}^2 r^2 dr = 1$. (v. Anexa 4).

Pentru aflarea funcției de undă $\psi(r, \theta, \varphi)$ va trebui să calculăm și componenta sferică $Y(\theta, \varphi)$, care este soluția ecuației (10.2.12). Se observă din nou, că punînd

$$Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta) \Phi(\varphi) \quad (10.2.47)$$

în ecuația (10.2.12) se separă variabilele

$$\left[\frac{1}{\Theta \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + l(l+1) \right] \sin^2 \theta = - \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} \quad (10.2.48)$$

Vom nota cu m_l^2 constanta comună a celor doi membri, deoarece cu această notație se va obține ecuația

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + m_l^2 \Phi = 0 \quad (10.2.50)$$

care este identică cu (8.8.122) și deci m_l va juca rol de *număr cuantic magnetic orbital* (vezi §8.8.7). Soluția normată a ecuației (10.2.50) este de formă

$$\Phi_{m_l}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\pm i m_l \varphi} \quad (10.2.51)$$

Pentru $\Theta(\theta)$, din (10.2.49) se obține ecuația

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left[l(l+1) - \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta = 0 \quad (10.2.52)$$

Această ecuație are soluții numai pentru $l \geq |m_l|$, de forma

$$\Theta_{l,m_l}(\theta) = (-1)^{m_l} (-1)^l \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m_l)!}{2(l+m_l)!}} \cdot P_l^{m_l}(\cos \theta). \quad (10.2.53)$$

În aceste funcții de undă proprii normate prin $P_l^{m_l}(\cos \theta)$ s-au notat polinoamele Legendre asociate, definite prin (v. Anexa 4).

$$P_l^{m_l}(x) = (1-x^2)^{\frac{|m_l|}{2}} \frac{d^{|m_l|}}{dx^{|m_l|}} P_l(x); \quad P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2-1)^l; \quad x = \cos \theta \quad (10.2.54)$$

iar m_l poate lua numai valorile :

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \quad (10.2.55)$$

Din cele expuse mai sus rezultă că funcțiile de undă proprii $\psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi)$, care descriu stările cuantificate ale electronului din atomul hidrogenoid sînt definite prin intermediul a trei numere cuantice, n -principal, l -orbital și m_l -magnetic orbital, fiind date prin expresii de formă

$$\psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) \Theta_{l,m_l}(\theta) \Phi_{m_l}(\varphi) \quad (10.2.56)$$

în care cele trei funcții $R_{n,l}(r)$, $\Theta_{l,m_l}(\theta)$ și $\Phi_{m_l}(\varphi)$ sînt exprimate prin relațiile (10.2.46); (10.2.51) și (10.2.53). Proprietățile geometrice ale acestor funcții determină forma orbitalilor atomici. De exemplu, pentru cîteva valori numerice ale numerelor n , l și m_l , se vor obține funcțiile

$$\begin{aligned} \psi_{100} &= \frac{1}{\sqrt{\pi r_B^3}} e^{-\frac{r}{r_B}}; \quad \psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi r_B^3}} \left(2 - \frac{r}{r_B} \right) e^{-\frac{r}{r_B}}, \quad \psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi r_B^3}} \frac{r}{r_B} e^{-\frac{r}{r_B}} \cos \theta \\ \psi_{211} &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi r_B^3}} \frac{r}{r_B} e^{-\frac{r}{r_B}} \sin \theta; \quad \psi_{32-1} = \frac{1}{81} \sqrt{\frac{2}{\pi r_B^3}} \left(\frac{r}{r_B} \right)^2 e^{-\frac{r}{r_B}} \sin \theta \cos \theta \cdot e^{i\varphi}, \end{aligned}$$

De remarcă că toți orbitalii cu $l = 0$ sînt *orbitali simetrici*. De asemenea, se constată că numărul cuantic radial n_r este în același timp egal și cu numărul de suprafețe cuprinse între $r = 0$ și $r = \infty$, pentru care funcția de undă se anulează, numite și *suprafețe nodale* (prin analogie cu liniile nodale de la vibrația unei membrane elastice). Numărul cuantic orbital l este egal cu numărul orbitalilor nesferici, iar numărul cuantic magnetic orbital m_l este egal cu numărul de moduri de orientare al acestor orbitali nesferici în spațiu. De aceea este util să reprezentăm orbitalii atomici sub formă grafică (vezi fig. 10.2.5), pentru a evidenția atât suprafețele

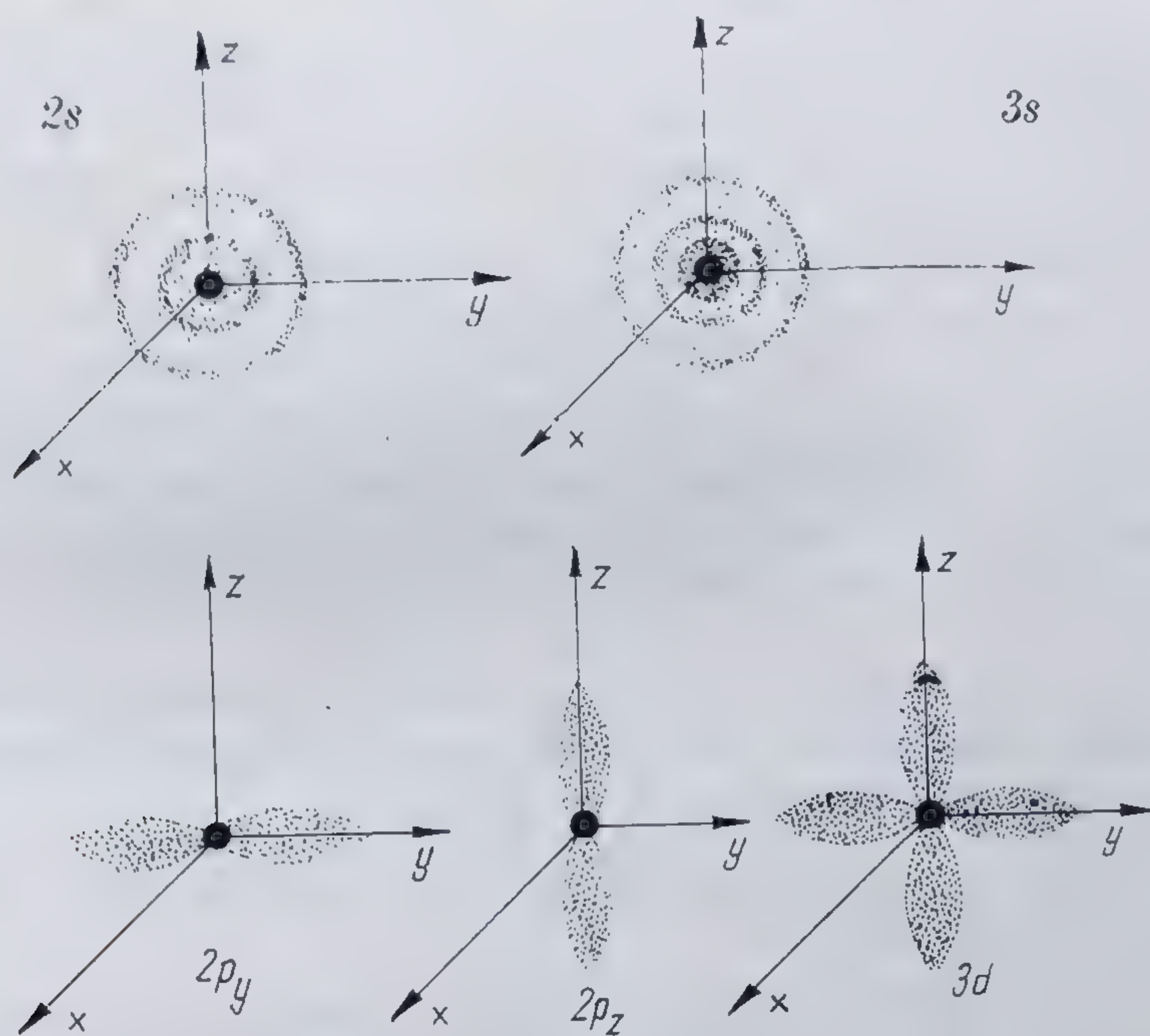


Fig. 10.2.5

nodale, cît și forma lor geometrică. Orbitalii atomici se notează în funcție de valorile lui l , așa cum se indică în tabelul următor :

l	0	1	2	3	4	5...
Denumirea orbitalului	s	p	d	t	g	h...

De remarcă că și în cazul atomului, unui nivel energetic E_n îi corespund mai multe stări cuantice, numărul lor g_n reprezentînd *gradul de degenerare* al respectivului nivel. Pentru un anumit număr cuantic principal n vor exista

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2 \quad (10.2.58)$$

stări distincte, întrucît fiecărei valori l îi vor corespunde $2l + 1$ valori pentru m_l .

Dar stărilor electronice din atom le sînt caracteristice și anumite proprietăți specifice cuantice (neîntîlnite în tratarea clasică), cum sînt *spinul și paritatea*. Noțiunea de spin a fost clarificată în § 8.11, unde s-a văzut că spinul introduce o degenerare de spin, $g_s = 2s + 1 = 2$, așa încît (10.2.58) trebuie de fapt scrisă sub forma

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l + 1) = 2n^2. \quad (10.2.59)$$

Rezultă, potrivit principiului de excluziune, că un nivel energetic atomic poate fi populat cu $2n^2$ electroni, $2(2l + 1)$ dintre aceștia fiind *electroni echivalenți*, în sensul că vor poseda aceeași energie și același moment cinetic orbital.

Stările electronice din atom se exprimă sub forma

$$nl^{2(2l+1)} = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 \dots \quad (10.2.60)$$

În ceea ce privește *paritatea*, ea intervine datorită faptului că ecuația Schrödinger atemporală rămîne invariantă față de operația de inversie spațială \hat{I}_s (operația care schimbă $x \rightarrow -x'$; $y \rightarrow -y'$; $z \rightarrow -z'$) și deci va trebui să considerăm, împreună cu starea $\psi(x, y, z)$, și starea

$$\psi(x', y', z') = \hat{I}_s \psi(x, y, z).$$

Avînd în vedere că $\hat{I}_s \hat{I}_s \psi(x', y', z') = \hat{I}_s^2 \psi(x, y, z) = \psi(x, y, z)$ și scriînd o ecuație de valori proprii pentru \hat{I}_s de forma

$$\hat{I}_s \psi(x, y, z) = \langle I_s \rangle \psi(x, y, z) \quad (10.2.61)$$

se obține

$$\langle I_s \rangle = \pm 1 \quad (10.2.62)$$

De aceea, vor exista două tipuri de funcții de undă și anume *funcția de undă pară*, pentru care $\langle I_s \rangle = +1$, și *funcția de undă impară*, pentru care $\langle I_s \rangle = -1$.

De notat că întrucît \hat{I}_s comută cu operatorul \hat{H} , paritatea stărilor electronice din atom va trebui să se conserve și pe parcursul tranzițiilor cuantice la care participă respectivul atom. Din această pricină, vor interveni opreliști în calea respectivelor tranziții, unele dintre ele neproducîndu-se tocmai datorită faptului că nu asigură *conservarea parității*. Cunoașterea *regulilor de selecție*, care fac posibilă o tranziție, este de importanță deosebită pentru studiul spectrelor atomice (§ 10.4). Deocamdată, să remarcăm că stările electronilor din imediata apropiere a nucleului, fiind stări descrise de o funcție de undă de forma (vezi 10.2.37) :

$$\psi(r) = \frac{1}{r} \chi_0(r) = Ar^l \quad (10.2.63)$$

paritatea lor va fi dată de numărul cuantic orbital l . Această înseamnă că „selecția” tranzițiilor atomice permise se va face funcție de valorile lui l din stările inițială și finală.

De notat totodată că considerațiile făcute mai sus sînt valabile numai pentru cazul cînd mișcările orbitale ale electronilor nu interacționează cu mișcările lor de spin, situație întîlnită numai la stările s , în care $\langle L_i \rangle = 0$. În atomii care conțin mai mulți electroni intervin și interacții de tip electric sau magnetic între electroni, interacții ce se realizează prin intermediul cuplajului *spin-orbită*.

În sfîrșit, să mai precizăm că teoria prezentată mai sus, pentru atomul hidrogenoid, a fost refăcută și în cadrul mecanicii cuantice relativiste, mai ales cu scopul de a se desluși structura fină a termenilor spectrali E_n . S-a folosit o ecuație Dirac de forma

$$[c \hat{\alpha} \hat{p} + m_e c^2] \psi = \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi \quad (10.2.64)$$

a cărei soluție poate fi ușor obținută [28, 59]. Firește, din această ecuație rezultă că momentul cinetic orbital al electronului nu se mai conservă. În schimb se conservă momentul cinetic total :

$$L_j = L_l + L_s \quad (10.2.65)$$

ale cărui valori cuantificate

$$\langle L_j \rangle = \hbar \sqrt{j(j+1)} \quad (10.2.66)$$

sînt selectate de numărul cuantic total j (vezi și § 10.3).

Pentru energia E_n a nivelelor energetice se obține expresia :

$$E_n = m_e c^2 - \frac{Z^2 e^4 m_e}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} - \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \right)^4 \frac{m_e c^2}{2n^2} \left(\frac{m_e}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{2} \right). \quad (10.2.67)$$

Se observă că acest rezultat conduce la o degenerare a stărilor cu același j , cărora trebuie să le corespundă aceeași energie. Astfel de stări sînt, de exemplu, stările $2S_{1/2}$ și $2P_{1/2}$ pentru care, deși $l = 0$, respectiv $l = 1$, numărul cuantic total j are aceeași valoare $j = \frac{1}{2}$ (pentru notații, vezi și § 10.3).

§ 10.3. ATOMI CU MAI MULȚI ELECTRONI. MODELUL VECTORIAL AL ATOMULUI

a) *Interacția spin-orbită*. În § 10.7 va fi studiată interacția electromagnetică dintre doi electroni care aparțin aceluiași atom, interacție care conduce la apariția unor *forțe de schimb*. Aici ne vom referi numai la o

interacție spin-orbită care poate fi descrisă, într-o primă aproximație, printr-un termen energetic de formă

$$V_{ls}(r) = A \langle \mu_l \rangle \cdot \langle \mu_s \rangle \quad (10.3.1)$$

unde prin $\langle \mu_l \rangle$ și $\langle \mu_s \rangle$ s-au notat momentele magnetice orbital și de spin.

Se observă că în acest caz interacția spin-orbită este o interacție de tip magnetic și de aceea vor exista atâtea valori pentru V_{ls} câte moduri de combinare vectorială există între $\langle \mu_l \rangle$ și $\langle \mu_s \rangle$. Potrivit unor relații de forma

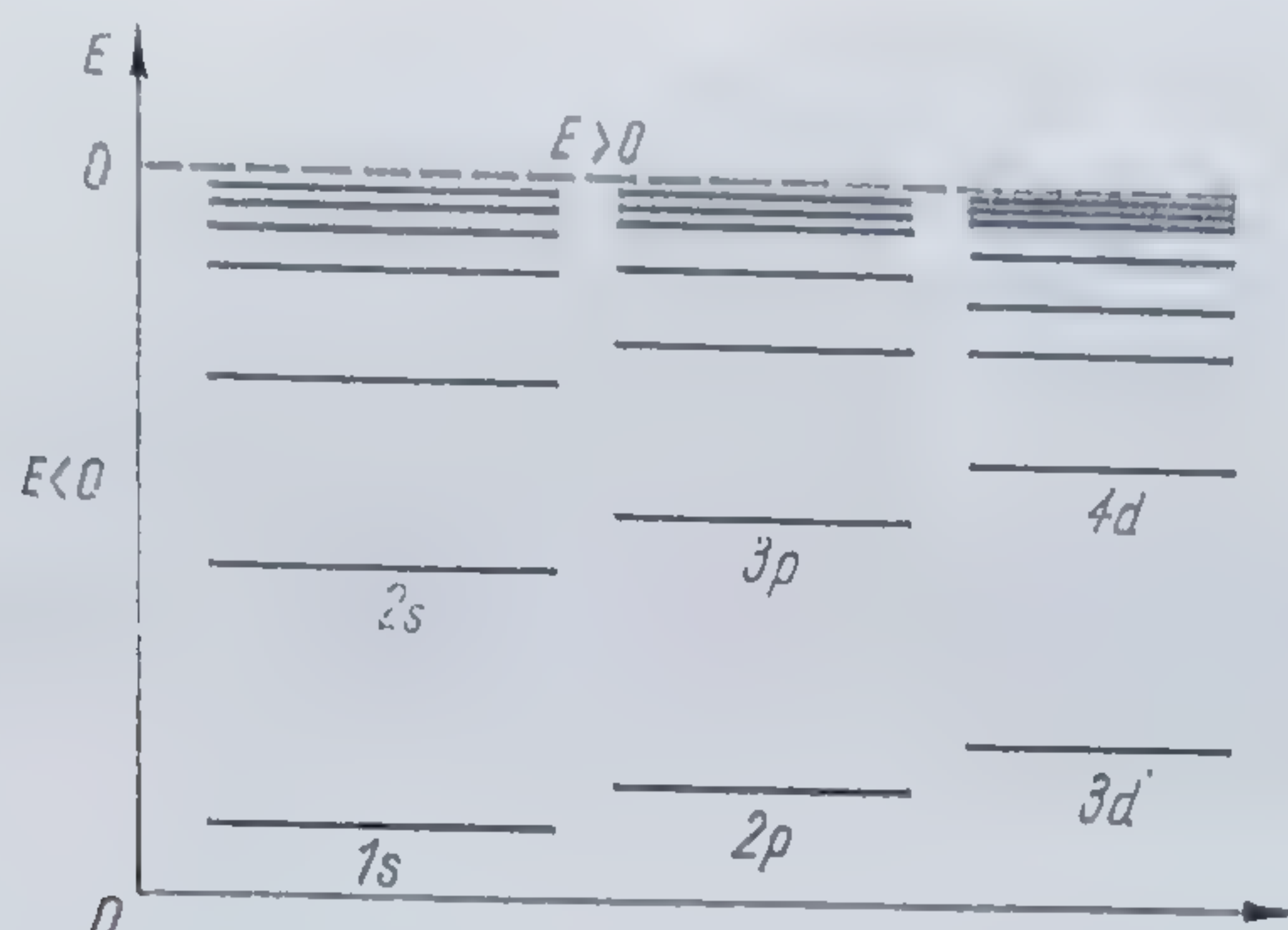


Fig. 10.3.1

(8.11.21), momentele magnetice sînt legate de momentele cinetice corespunzătoare, prin relații de forma

$$\langle \mu_l \rangle = \gamma_l \langle L_l \rangle; \quad \langle \mu_s \rangle = \gamma_s \langle L_s \rangle \quad (10.3.2)$$

γ fiind raportul giromagnetic, dat de expresia

$$\gamma_{l,s} = g_{l,s} \frac{e}{2m_e} \quad (10.3.3)$$

Aici prin $g_{l,s}$ s-a notat așa numitul *factor de despicare spectroscopică*, avînd valorile $g_l = 1$ și $g_s = 2$ (vezi și § 10.6). De aceea, vor exista atîtea moduri de combinare vectorială între $\langle \mu_l \rangle$ și $\langle \mu_s \rangle$ cîte valori cuantificate are momentul cinetic intern $\langle L_j \rangle$, definit prin expresia (8.11.13). Aceste valori sînt date de expresia

$$\langle L_j \rangle = \hbar \sqrt{j(j+1)} \quad (10.3.4)$$

în care j are semnificația de *număr cuantic intern*.

Pentru găsirea valorilor posibile ale lui j s-a creat un *model vectorial al atomului*, în care numerelor cuantice care selectează valorile cuantificate ale momentelor cinetice (aceste momente fiind mărimi vectoriale) li se atribuie o semnificație vectorială. În acest caz, vom avea :

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s} \quad (10.3.5)$$

ceea ce înseamnă că pentru un electron atomic j va lua numai următoarele două valori

$$j_1 = l + 1/2, \quad j_2 = l - 1/2. \quad (10.3.6)$$

De remarcat că în cazul atomilor cu mai mulți electroni se pot imagina două moduri de cuplare ale mișcărilor orbitale și de spin și anume, cele două moduri exprimate simbolic prin schemele

$$[(l_1, s_1) (l_2, s_2)] = [j_1, j_2] = J \quad (10.3.7.)$$

$$[(l_1, l_2) (s_1, s_2)] = [L, S] = J. \quad (10.3.7.)$$

Primul mod de cuplare este cunoscut sub denumirea de „cuplaj de tip $j-j''$ ”, iar al doilea, de „cuplaj de tip Russel-Saunders”. Cuplajul Russel-Saunders se realizează aproape în toate cazurile (excepție fac stările puternic excitate ale elementelor grele). De aceea, pentru un atom cu mai mulți electroni vom lua

$$J = \sum_i l_i + \sum_i s_i = L + S \quad (10.3.8)$$

Se observă că J poate parcurge următoarele valori

$$J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S| \quad (10.3.9)$$

existînd, în total, un număr de $2S + 1$ astfel de valori distincte, pentru cazul cînd $L > S$ și $2L + 1$ valori distincte, pentru cazul cînd $L < S$. Numărul acestor valori distincte reprezintă *multiplicitatea spectrală* a respectivului nivel, deoarece acest număr este egal cu numărul de subnivele în care se va despică nivelul E_n datorită interacției spin-orbită. Această despicare apare ca urmare a faptului că nivelele cu număr orbital l mai mare au o energie totală mai mare (crește contribuția termenului orbital pozitiv în expresia energiei totale E_n , conform relației (10.2.32)) și se vor situa deci deasupra nivelelor cu $l = 0$ (fig. 10.3.1). Se poate întîmpla ca datorită acestui efect, un nivel cu n mic, dar cu l mare, să se găsească deasupra unui nivel cu n mare, dar l mic, așa cum este cazul nivelului $3d$, în raport cu nivelul $4s$.

Denumirea de multiplicitate spectrală provine de la faptul că o despicare de felul celei menționate intervine efectiv în cazul liniilor spectrale ce se obțin atunci cînd atomul suferă o tranziție dintr-o stare staționară în alta, prin emisie sau absorbție de radiație luminoasă. Multiplicitatea spectrală ne arată deci cîte componente ale *structurii fine* va conține respectiva linie spectrală. De exemplu, în cazul Na, întrucît $S = 1/2$, $L = 0$ și $J = 1/2$, se va obține o multiplicitate spectrală $2S + 1 = 2$ și deci liniile spectrale emise de către Na vor avea o *structură de dublet*. Această concluzie este atestată de experiență, pentru Na fiind caracteristic dubletul din domeniul galben al spectrului, cu $\lambda_1 = 5889,953 \text{ \AA}$ și $\lambda_2 = 5895,930 \text{ \AA}$. În cazul He, avem $S = 0$, $L = 0$, $J = 0$ și deci liniile sale spectrale au o *structură de singlet*, iar funcția de undă este pară.

Pentru a preciza toate caracteristicile spectrale ale stărilor atomice menționate mai sus s-a introdus noțiunea de *termen spectral*, descris prin notația

$$^{2S+1}L_J^{\pm p} \quad (10.3.10)$$

denumirea stărilor atomice făcându-se prin analogie cu ale celor electronice, astfel :

L	0	1	2	3	4	5	6...
Starea atomică	S	P	D	F	G	H	I...

Indicii p sau i din partea dreaptă de sus indică paritatea funcției de undă (p — pentru funcția pară și i pentru impară). De exemplu, în starea fundamentală, carbonul ^{12}C care are structura electronică ($1s^2 2s^2 2p^2$), va fi descris de termenul $^3P_0^o$ (se citește : „triplet P zero par).

Desigur, prin stare *fundamentală* se va înțelege starea cu energie minimă. Toate stările cu energie superioară celei fundamentale se vor numi *stări excitate*. Pentru aflarea stării fundamentale a unui atom se folosesc așa numitele *reguli ale lui Hund*, obținute din studiul unor mari cantități de informație din domeniul analizei spectrale. *Prima regulă Hund* stabilește că în starea fundamentală numerele cuantice S (de spin) și L (orbital) au valorile maxime posibile (fără a se încălca însă principiul de excluziune a lui Pauli), iar a *doua regulă Hund* stabilește că în starea fundamentală $J = |L - S|$, dacă orbitalul este populat mai puțin de jumătate și $J = L + S$, când orbitalul este populat mai mult de jumătate. Rezultă deci că în cazul ^{12}C ($1s^2, 2s^2, 2p^2$) vom avea $s = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} +$

$$+ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 \text{ și } |L|_{\max} = |l_1 + l_2|_{\max} = 1, \text{ respectiv } J = L - S = 0.$$

Funcția de undă atomică va fi pară, întrucît $\Sigma l = 2$. În mod analog se pot stabili stările fundamentale ale tuturor atomilor, câteva exemple fiind prezentate în tabelul următor :

Atomul	^1_1H	^4_2He	$^{16}_8\text{O}$	$^{20}_{10}\text{Ne}$	$^{36}_{25}\text{Mn}$	$^{140}_{58}\text{Ce}$
Starea fundamentală	$1^2S_{1/2}^o$	$1^1S_0^o$	$3^3P_0^o$	$2^1S_0^o$	$4^6S_{5/2}^o$	$6^2F_{5/2}^o$

De remarcat că stările fundamentale ale *elementelor nobile* (He, Ne, Ar, Kr, Xe și Rn) sînt *stări de singlet* și, de aceea, în socotirea stărilor fundamentale ale atomilor vor trebui luați în considerare numai orbitalii necomplet populați cu electroni (pentru cei complet populați $L = S = J = 0$).

b) *Popularea cu electroni a orbitalilor atomici. Sistemul periodic al elementelor chimice.* Problema determinării structurii electronice a atomilor, respectiv a modului de populare cu electroni o orbitalilor atomici, este deosebit de importantă pentru fizica atomului, întrucît această structură le determină în bună parte atît proprietățile fizice, cît și cele chimice. Desigur, popularea cu electroni se va face în conformitate cu

principiul de excluziune (fiecare stare va fi populată cu un singur electron) și al energiei minime.

Întrucât unui orbital l îi corespund stări distincte, cu următoarele valori ale numărului cuantic magnetic intern m_l

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm j \quad (10.3.11)$$

(deci în total $2j + 1$ stări), iar $j = l + 1/2$, va exista în total un număr

$$\sum_{j=l-1/2}^{j=l+1/2} (2j+1) = 2(2l+1) \quad (10.3.12)$$

de electroni echivalenți și un număr

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2 \quad (10.3.13)$$

de electroni pe nivelul n , rezultate identice cu cele exprimate prin (10.2.59) și obținute în ipoteza inexistenței interacției spin-orbită.

Rezultatele de mai sus pot fi puse în corespondență cu perioadele sistemului lui Mendeleev. Diferențe între numărul $2n^2$ și numărul de elemente dintr-o perioadă încep să apară la perioada a 4-a. Astfel, la $_{19}\text{K}$, în locul distribuției $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1$, prevăzută de teorie se realizează distribuția $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$, adică electronul de valență al potasiului în loc să populeze orbitalul $3d$, populează orbitalul $4s$, a cărui energie este mai mică decât a orbitalului $3d$. Dar orbitalul $4s$ se găsește la o distanță mai mare de nucleu decât orbitalul $3d$. Va apare astfel un orbital interior necomplet populat. Acesta va determina o serie de proprietăți distincte atomului respectiv, datorită faptului că spinul total al orbitalilor atomici necomplet populați este întotdeauna diferit de zero.

Elementele ai căror atomi posedă orbitali interiori necomplet populați se numesc *elemente de tranziție*. Sînt cunoscute următoarele grupe de astfel de elemente :

— *grupa fierului*, cu orbitalul „ $3d$ ” necomplet populat, conține următoarele elemente și anume : $_{21}\text{Sc}$, $_{22}\text{Ti}$, $_{24}\text{V}$, $_{25}\text{Cr}$, $_{26}\text{Mn}$, $_{27}\text{Fe}$, $_{28}\text{Co}$ și $_{29}\text{Ni}$,

— *grupa paladiului*, cu orbitalul „ $4d$ ” necomplet populat ($_{39}\text{Y}$, $_{40}\text{Zr}$, $_{41}\text{Nb}$, $_{42}\text{Mo}$, $_{43}\text{Te}$, $_{44}\text{Rn}$, $_{45}\text{Rh}$, $_{46}\text{Pd}$),

— *grupa platinei*, cu orbitalul „ $5d$ ” necomplet populat ($_{57}\text{La}$, $_{71}\text{Lu}$, $_{72}\text{Hf}$, $_{73}\text{Ta}$, $_{74}\text{W}$, $_{75}\text{Re}$, $_{76}\text{Os}$, $_{77}\text{Tr}$, și $_{78}\text{Pt}$)

— *grupa pământurilor rare*, cu orbitalul $4f$ necomplet populat ($_{58}\text{Ce}$, $_{59}\text{Pr}$; $_{60}\text{Na}$; $_{61}\text{Pm}$; $_{62}\text{Sm}$; $_{63}\text{Eu}$; $_{64}\text{Gd}$; $_{65}\text{Tb}$; $_{66}\text{Dy}$; $_{67}\text{Ho}$, $_{68}\text{Er}$; $_{69}\text{Tm}$; $_{70}\text{Yb}$)

— *grupa actinidelor*, cu orbitalii $6d$ și $5f$ necomplet populați ($_{89}\text{Ac}$; $_{90}\text{Th}$; $_{91}\text{Pa}$; $_{92}\text{U}$; $_{93}\text{Np}$; $_{94}\text{Pu}$, $_{95}\text{Am}$; $_{96}\text{Cm}$; $_{97}\text{Bk}$; $_{98}\text{Cf}$; $_{99}\text{Es}$, $_{100}\text{Fm}$, $_{101}\text{Md}$; $_{102}\text{Nb}$, ...)

Nu este greu să stabilim structura electronică a unui atom dintr-o grupă de tranziție. În cazul ruteniului de exemplu, fiind al 5-lea element de tranziție din grupa paladiului ar trebui să aibă pentru ultimul orbital structura $4d^6 5s^2$, dar un electron $5s$ trece pe orbitalul $4d$ și se realizează structura $4d^7 5s^2$, starea fundamentală fiind o stare $5F_5$.

§ 10.4. STĂRI ATOMICE EXCITATE. EMISIA SPONTANĂ ȘI STIMULATĂ DE RADIAȚIE. SPECTRE ATOMICE

Dacă unui atom aflat în stare fundamentală i se transferă energie din exterior, atunci el va trece într-o *stare excitată*, corespunzătoare unui nivel energetic superior. Într-o astfel de stare, atomul va rămâne un anumit interval de timp, $\Delta t = \tau$, după care revine în starea fundamentală (sau într-o stare de energie inferioară celei excitate).

Există mai multe posibilități de a excita un atom și anume: prin ciocniri cu electroni, pe cale termică (deci prin ciocniri atomice și moleculare) și prin acțiunea unor câmpuri electroimagnetice exterioare. Experiența arată că revenirea în starea fundamentală se face, de regulă, prin emisia unor cuante de radiație electromagnetică.

În §9.6 a fost studiată radiația emisă de corpurile încălzite, deci când excitarea atomică se realizează pe cale termică, prin ciocniri moleculare. S-a văzut că *radiația de corp absolut negru*, care se obține în acest caz, este o radiație total nemonocromatică și total necoerentă, întrucât ea conține o infinitate de frecvențe, distribuite continuu și o infinitate de faze, distribuite haotic. Vom expune, în continuare, studiul cazului în care asupra unui sistem de atomi aflați în starea excitată de energie E_2 acționează și un câmp de radiații, cu frecvențe apropiate de frecvența ν_{12} pe care o va emite atomul când acesta revine în starea sa fundamentală, cu energia E_1 (fig. 10.4.1), frecvență dată de relația

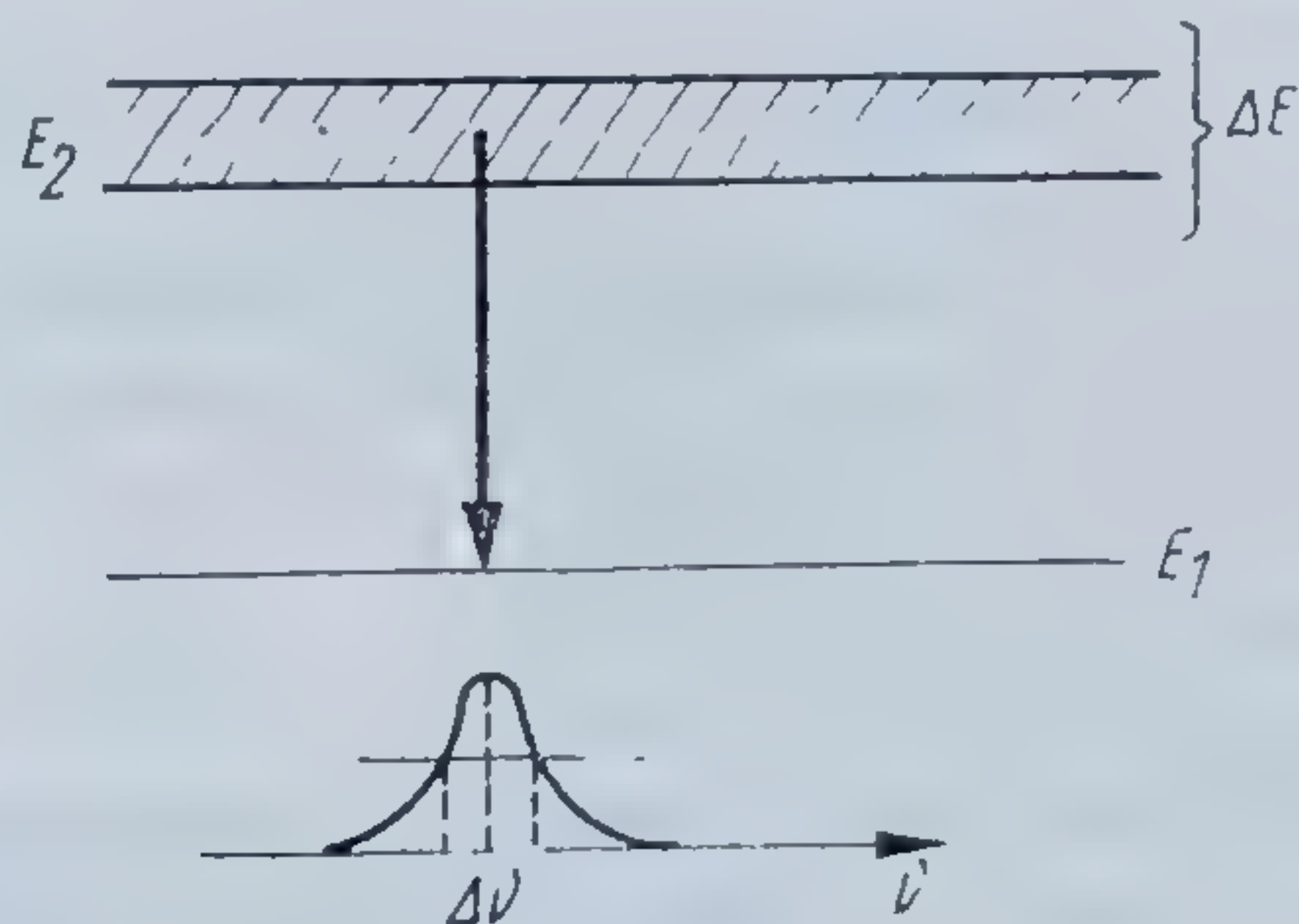


Fig. 10.4.1

$$h\nu_{12} = E_2 - E_1. \quad (10.4.1)$$

În conformitate cu relația de nedeterminare (8.3.18), nivelul excitat E_2 va prezenta o anumită *lărgime naturală*, ΔE , dată de relația

$$\Delta E \sim h/\tau. \quad (10.4.2)$$

Rezultă de aici că cu cât τ este mai mare, cu atât ΔE va fi mai mic. Pentru electronii situați în profunzimea atomului, de exemplu, dată fiind interacția puternică cu nucleul atomic se vor obține nivele de largimi foarte mici, numite și *nivele Röntgen*, deoarece tranzițiile între aceste nivele conduc la apariția spectrelor de *radiații X caracteristice*. În terminologia spectrală, acestor stări le corespund termeni spectrali notați cu L_I pentru $2S_{1/2}$, L_{II} pentru $2P_{1/2}$, L_{III} pentru $2P_{3/2}$, ș.a.m.d.

În cazul electronilor periferici, numiți adesea și *electroni optici*, intervalul de timp în care are loc emisia este de ordinul, $\tau \simeq 10^{-8}$ s și se va obține o largime ΔE mai mare decât în cazul nivelelor X, dar încă totuși suficient de mică în comparație cu diferența $(E_2 - E_1)$. O astfel de largime ΔE a nivelului excitat determină *largimea naturală* $\Delta \nu$ a liniei spectrale emise la dezexcitarea atomului (fig. 10.4.1.)

Să vedem, în continuare cum poate influența un câmp de radiație electromagnetică tranzițiile cu emisie sau absorbție de fotoni ale atomilor. Analizând o astfel de problemă, A. Einstein formulează, încă din anul 1917, ipoteza că pe lângă *emisia spontană* a fotonilor pot interveni și *emisia sau absorbția stimulate* de către câmpul electromagnetic al radiațiilor cu frecvența $\nu \simeq \nu_{12}$. Întrucât interacției electronului optic cu acest câmp îi revine o energie $E' \ll (E_2 - E_1)$, această interacție poate fi considerată ca o *perturbație*, întreaga problemă înscriindu-se în cadrul teoriei perturbăției (§ 8.10). Într-adevăr, luând un hamiltonian de forma (6.5.25), în care se presupune că potențialul scalar este nul, prin calcule simple se obține expresia

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} (\hat{\mathbf{p}} - e\hat{\mathbf{A}})^2 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta - \frac{e}{m_e} (-i\hbar \nabla \hat{\mathbf{A}}) + \frac{e^2}{2m_e} \hat{\mathbf{A}}^2 = \hat{H}_0 + \hat{H}'. \quad (10.4.3)$$

Acest hamiltonian va descrie starea cuantică a electronului în câmpul de radiație, dat prin potențialul vector \mathbf{A} . Întrucât termenul

$$\hat{H}' = -\frac{e}{m_e} (\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{A}}) + \frac{e^2}{2m_e} \hat{\mathbf{A}}^2 \quad (10.4.4)$$

este mic în comparație cu \hat{H}_0 , el poate fi tratat ca o perturbăție. Punind și emisia spontană pe seama unei astfel de perturbății, de valoare egală cu largimea naturală ΔE a nivelului excitat, întreaga problemă a tranzițiilor spontane și stimulate va putea fi tratată cu ajutorul teoriei perturbățiilor cuantice.

În § 8.10 s-a văzut că probabilitatea unei astfel de tranziții între două nivele E_2 și E_1 , provocată de o perturbăție descrisă prin \hat{H}' , este dată de expresia :

$$w_{12} = \frac{2\pi}{\hbar} |\hat{H}'_{12}(0)|^2 \delta(E_2 - E_1 - \hbar\omega) \quad (10.4.5)$$

unde cu $|\hat{H}'_{21}(0)|$ s-au notat *momentele de tranziție* definite prin

$$|\hat{H}'_{21}(0)| = \int \psi_1^+ \hat{H}' \psi_2 d\mathcal{V}. \quad (10.4.6)$$

Dacă ținem seama și de lărgimea ΔE a nivelului E_2 , atunci vom fi obligați să introducem o funcție $\Gamma(E)$, care să descrie distribuția stărilor energetice în cadrul intervalului ΔE . Desigur că o astfel de distribuție* va trebui să fie normată, adică să se supună condiției

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Gamma(E) dE = 1. \quad (10.4.7)$$

Având în vedere că

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(E_2 - E_1 - \hbar\omega) \Gamma(E) dE = \Gamma(E_2 = E_1 + \hbar\omega) \quad (10.4.8)$$

se poate scrie

$$w_{2 \rightarrow 1} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{21}(0)|^2 \Gamma(E_2 = E_1 + \hbar\omega). \quad (10.4.9)$$

Probabilitatea tranzițiilor de pe stările cuprinse în intervalul $d\Gamma$, pe nivelul E_1 , va fi dată atunci de :

$$dw_{2 \rightarrow 1} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{21}(0)|^2 \Gamma(E_2 - E_1 - \hbar\omega) d\Gamma \quad (10.4.10)$$

unde, potrivit lui (8.8.33),

$$d\Gamma = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} dk_x dk_y dk_z = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} k^2 dk. \quad (10.4.11)$$

Se știe că în locul acestui număr diferențial de stări din spațiul (k) se poate defini o densitate energetică $\rho(E)$ de stări, prin

$$\rho(E) = \frac{d\Gamma}{\mathcal{V} \Delta \Omega \hbar d\omega} = \frac{1}{\hbar} \rho(\omega) \quad (10.4.12)$$

$\rho(\omega)$ fiind densitatea spectrală de stări (vezi și (8.8.9)), astfel încît

$$dw_{2 \rightarrow 1} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{21}(0)|^2 \rho(E) \delta(E_2 - E_1 - \hbar\omega) \Delta \Omega dE. \quad (10.4.13)$$

Prin integrare în raport cu E se obține

$$\Delta w_{2 \rightarrow 1} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{21}(0)|^2 \Delta \Omega \rho(E) = \frac{2\pi}{\hbar^2} |H'_{21}(0)|^2 \Delta \Omega \rho(\omega) \quad (10.4.14)$$

unde cu $\Delta \Omega$ s-a notat elementul de unghi solid.

* Uneori în locul $\Gamma(E)$, se folosește funcția $\Gamma(\nu) = \pi \hbar \Gamma(E)$, numită funcție de lărgime naturală a liniei spectrale.

De menționat că momentele de tranziție $|H'_{21}(0)|^2$, care intervin în probabilitățile de tranziție de mai sus, pot fi calculate cu diverse grade de aproximație. Pentru aproximația mai frecvent folosită se ia în considerație numai primul termen din (10.4.4), care poate fi transformat astfel

$$\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = m_e \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle = \frac{im_e}{h} (E_2 - E_1) \langle \hat{\mathbf{r}}_{12} \rangle = im_e \omega \langle \hat{\mathbf{r}}_{12} \rangle. \quad (10.4.15)$$

Atunci

$$\hat{H}' = -i\omega \langle \hat{\mathbf{p}}_e \hat{\mathbf{A}} \rangle \quad (10.4.16)$$

unde prin $\hat{\mathbf{p}}_e = e \hat{\mathbf{r}}$, s-a notat operatorul moment dipolar electric, iar prin $\hat{\mathbf{A}}$ operatorul potențial vector.

În § 8.9 s-a arătat că, pentru cuantificarea unui câmp electromagnetic, operatorul $\hat{\mathbf{A}}$ trebuie înlocuit cu componentele sale Fourier, $\hat{\mathbf{A}}_k^p e^{ikr}$ și $\hat{\mathbf{A}}_k^{p*} e^{-ikr}$, care posedă diverse stări de polarizare, marcate prin versorii \mathbf{e}_p , iar operatorii $\hat{\mathbf{A}}_k^p$ și $\hat{\mathbf{A}}_k^{p*}$ se exprimă prin intermediul operatorilor de generare \hat{a}^+ și de anihilare \hat{a} , în conformitate cu (8.9.13). Cu aceste transformări, pentru probabilitatea de tranziție (10.4.14) se obține expresia :

$$\Delta w_{2 \rightarrow 1} = \frac{2\pi}{h^2} \left\{ \int \psi_1^* \left[-i\omega \left(\frac{h}{2\varepsilon\omega_0 V} \right)^{1/2} (\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{e}_p) e^{ikr} \hat{a}^+ \right]^2 \psi_2 dV \right\} \Delta\Omega \rho(\omega). \quad (10.4.17)$$

Avînd în vedere că potrivit relațiilor (8.8.118) putem scrie

$$\hat{a}^{+2} \psi_2 = \hat{a}^+ (\hat{a}^+ \psi_2) = \sqrt{n_k + 1} \hat{a}^+ \psi_2 = (n_k + 1) \psi_2 \quad (4.4.19)$$

rezultă că probabilitatea tranzițiilor însoțite de emisie stimulată a fotonilor, ce se realizează în unitatea de timp și în intervalul $\Delta\Omega$ de unghi solid va fi dată de expresia :

$$\Delta W_{2 \rightarrow 1} = \frac{\pi\omega(n_k + 1)}{h\varepsilon_0} (|\hat{\mathbf{p}}_e \cdot \mathbf{e}_p|)^2 \Delta\Omega \rho(\omega). \quad (10.4.20)$$

Aici prin $|\hat{\mathbf{p}}_e \cdot \mathbf{e}_p|^2$ s-au notat pătratele elementelor de matrice ale momentului dipolar electric în starea de polarizare \mathbf{e}_p .

Într-un mod cu totul analog se va obține, desigur, expresia probabilității tranzițiilor însoțite de absorbții stimulate

$$\Delta W_{1 \rightarrow 2} = \frac{\pi\omega n_k}{h\varepsilon_0} |\hat{\mathbf{p}}_e \cdot \mathbf{e}_p|^2 \Delta\Omega \rho(\omega). \quad (10.4.21)$$

Comparînd aceste ultime două expresii obținem că cele două procese, adică emisia și absorbția stimulată de radiație, se produc cu probabilități aproape egale. Într-adevăr, $\Delta W_{2 \rightarrow 1} / \Delta W_{1 \rightarrow 2} = \frac{n_k + 1}{n_k} \simeq 1$, pentru $n_k \gg 1$,

Un astfel de rezultat a fost intuit de către Einstein, încă din anul 1917.

În general, momentele dipolare p_e pot avea diverse direcții în raport cu direcția de vibrație e_p a câmpului electric al unde. Mediind valoarea lui $\Delta W_{1 \rightarrow 2}$ pentru toate unghiurile θ pe care p_e le face cu e_p , se va obține expresia

$$\begin{aligned} w_{2 \rightarrow 1} &= \frac{\pi \omega}{\hbar \epsilon_0} |(\hat{p}_e)_{21}|^2 (n_k + 1) \rho(\omega) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta = \\ &= \frac{4\pi^2 \omega}{3\hbar \epsilon_0} |(\hat{p}_e)_{21}|^2 n_k \rho(\omega) = w_{1 \rightarrow 2}. \end{aligned} \quad (10.4.22)$$

Pe baza acestui rezultat se poate calcula transferul energetic dintre câmp și sistemul de atomi, transfer ce se realizează prin procese de emisie spontană și stimulate și de absorbție stimulată a fotonilor de radiație.

În cazul unor tranziții stimulate, expresia (10.4.22) se va scrie sub forma

$$w_{2 \rightarrow 1} = \frac{4\pi^2 \hbar \omega}{3\hbar^2 \epsilon_0} |(\hat{p}_e)_{12}|^2 n_k \rho(\omega) = B_{21} n_k \hbar \omega \rho(\omega) \quad (10.4.23)$$

unde prin

$$B_{21} = B_{12} = \frac{4\pi^2}{3\hbar^2 \epsilon_0} |(\hat{p}_{12})_{12}|^2 \quad (10.4.24)$$

au fost notați așa-numiții *coeficienți Einstein* ai tranzițiilor stimulate. Introducând și pentru emisia spontană un coeficient A_{21} , care să exprime probabilitatea de emisie spontană a unui foton în unitate de timp, atunci vom putea face următorul bilanț energetic al proceselor de emisie și de absorbție, pentru regimul termodinamic staționar: dacă există N_1 atomi în starea cu energia E_1 și N_2 în starea cu energia E_2 , atunci vor exista $[B_{21} \rho(\omega) + A_{21}] N_2$ procese de emisie de radiație și $B_{12} N_1 \rho(\omega)$ procese de absorbție de radiație, astfel încât în regim staționar trebuie să avem

$$\{N_2(B_{21} \rho(\omega) + A_{21}) - N_1 B_{12} \rho(\omega)\} \hbar \omega = 0. \quad (10.4.25)$$

Din această condiție, cu distribuții ale atomilor pe nivele energetice de tip Boltzmann de forma

$$\frac{N_1}{N_2} = e^{(E_2 - E_1)/k_b T} = e^{\hbar \omega / k_b T} \quad (10.4.26)$$

rezultă pentru densitatea spectrală $\rho(\omega)$ a radiației expresia

$$\rho(\omega) = \frac{A_{21}}{B_{12}(e^{\hbar \omega / k_b T} - 1)}. \quad (10.4.27)$$

De remarcat că o astfel de relație este de forma legii lui Planck (9.6.5). Dacă se pune

$$B_{21} = \frac{\pi^2 c^2}{\hbar \omega^3} A_{21} \quad (10.4.28)$$

atunci se găsește că proporția radiației emise stimulat este, comparativ cu radiația emisă spontan, dată de raportul

$$\frac{B_{21}}{A_{21}} = \frac{1}{e^{h\omega/k_bT} - 1} \quad (10.4.29)$$

Se observă că în condiții obișnuite, la temperaturi $T \simeq 10^4$ K, valoarea acestui raport este neînsemnată și deci sursele obișnuite emit aproape integral radiația luminoasă prin procese spontane. Dacă însă s-ar asigura o temperatură mult mai ridicată ($T = 10^{20} \div 10^{30}$ K), atunci $B_{21}/A_{21} \gg 1$ și o astfel de sursă începe să emită în mod preponderent radiație stimulată.

O sursă care emite preponderent radiații stimulate se numește sursă de tip *LASER*, *IRASER* sau *MASER*. Aceste surse emit, așa cum se poate constata din (10.4.22), radiații coerente și absolut monocromatice, cu starea de polarizare a radiației stimulatorie. Sursele cu emisie de radiație preponderent stimulată se realizează însă prin tehnica *inversiei de populație*, care constă în suprapopularea nivelului E_2 cu un număr N_2 de atomi mai mare decât numărul N_1 de atomi care populează nivelul $E_1 < E_2$. În acest caz, se observă că din (10.4.26), rezultă

$$T = - \frac{E_2 - E_1}{k_b} \ln \frac{N_2}{N_1} < 0 \quad (10.4.30)$$

adică un mediu în care s-a realizat o inversie de populație este caracterizabil, din punct de vedere termodinamic, printr-o *temperatură absolută negativă*. El se numește *mediu activ*, această calitate putînd fi creată atît unor medii solide, cît și gazelor.

De exemplu, există MASERI (Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation) cu amoniac gazos, NH_3 , dar și LASERI (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation) cu rubin, cu joncțiune $p - n$ sau cu gaze ($\text{He} - \text{CO}_2$; $\text{He} - \text{Ne}$ etc). Aceste medii posedă două sau trei nivele de energie cuantificate, între care, prin diverse procedee (pompaj optic, transfer de energie prin ciocniri moleculare, etc.) se realizează inversii de populație însoțite de emisii stimulate de radiație.

Maserul cu amoniac a fost realizat în anul 1954 de către Gordon, Zeiger și Townes, care folosesc cele două stări cuantice de vibrație ale moleculei de amoniac (fig. 10.4.2,a), una corespunzînd vibrației atomului de N cu intersecția planului celor trei atomi de H, iar cealaltă fără o astfel de intersecție. Între cele două nivele, diferența de energie corespunde unei frecvențe din domeniul microundelor

$$\nu_r = \frac{1}{h} (E_2 - E_1) = 23\,870 \text{ MeV} \quad (10.4.31)$$

Inversia de populație se realizează printr-o excitare termică a moleculelor de amoniac și o separare ulterioară a moleculelor excitate de cele neexcitate, pe cale electrică. În acest scop, moleculele încălzite într-o

încintă 1 (fig. 10.4.3) sînt trecute printr-o lentilă electrostatică cvadru-polară 2 (aceasta separă moleculele neexcitate de cele excitate, ultimele fiind introduse într-o cavitate rezonatoare de microunde 3, acordată pe lungimea de undă $\lambda = c/\nu_r = 1,25$ cm). În prezența unor microunde,

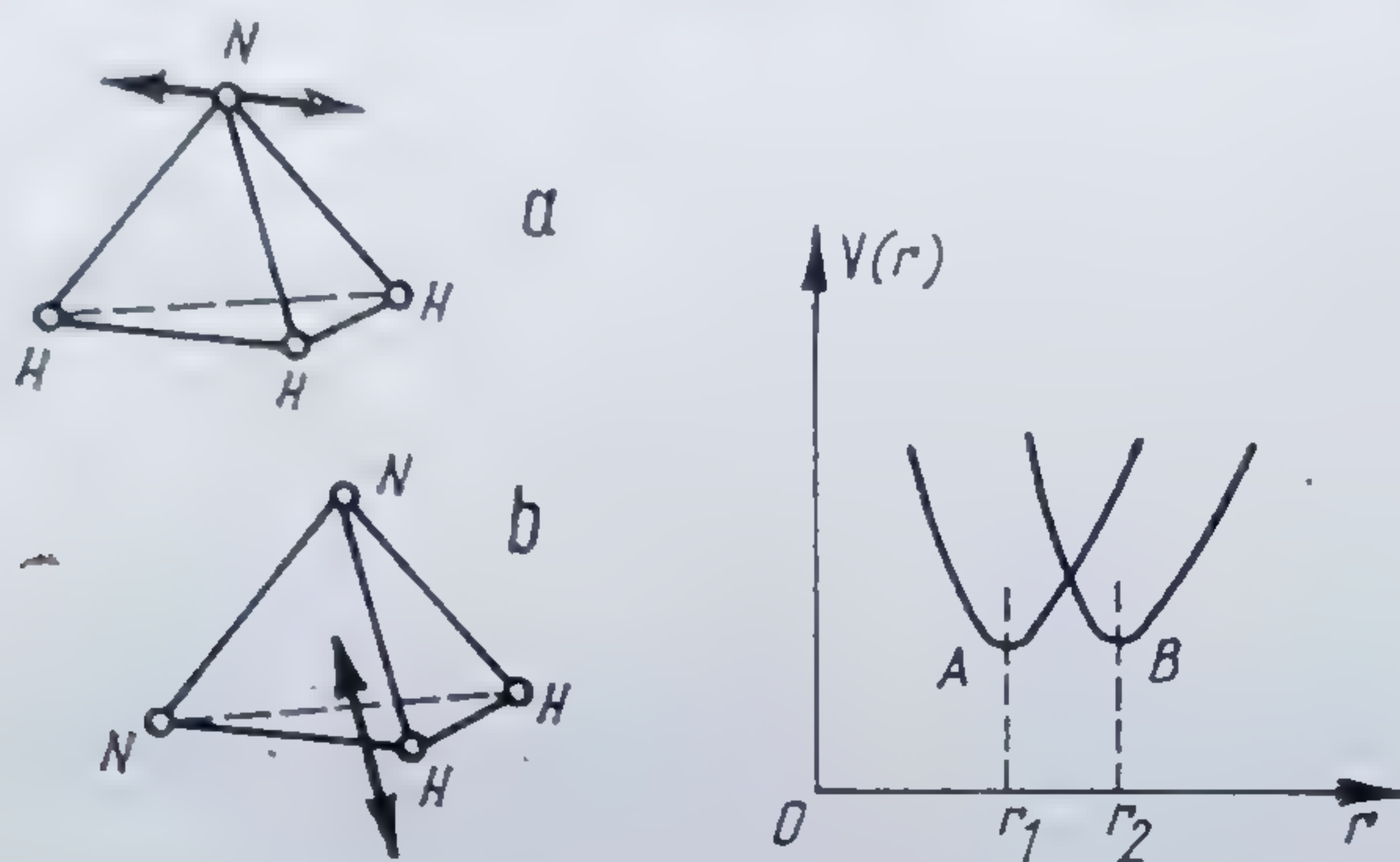


Fig. 10.4.2

cu frecvența de 23 870 MHz se produc tranziții cu emisie stimulată de microunde de aceeași frecvență ν_r , care vor modifica sensibil factorul de calitate al cavității rezonatoare pentru o frecvență egală cu ν_r . Această modificare poate fi determinată cu mare precizie și, de aceea, cu ajutorul

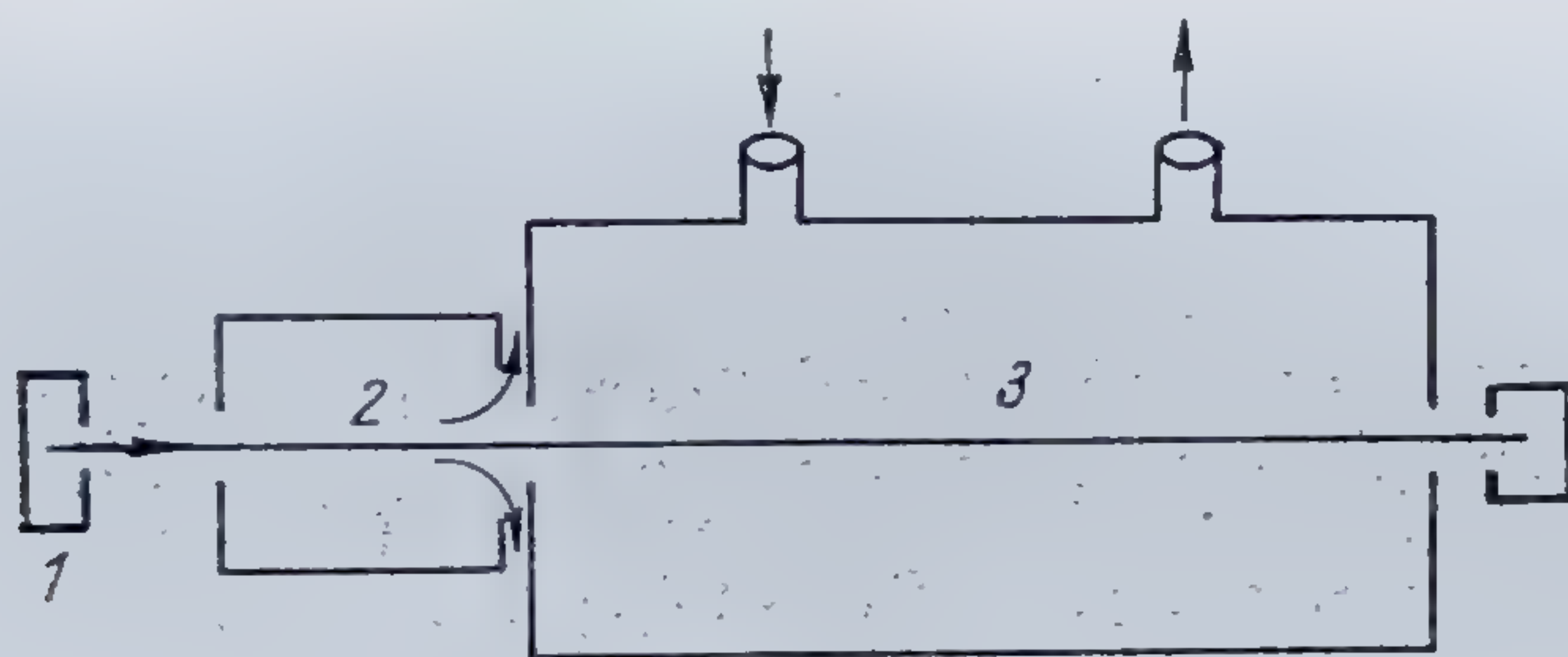


Fig. 10.4.3

maserului cu NH_3 s-a realizat un etalon de frecvență, denumit adesea „ceasornic atomic”.

A fost realizat și un maser cu rubin — cristal de Al_2O_3 impurificat cu ioni de crom, dar rubinul se folosește mult mai frecvent ca mediu activ pentru laser. Inversia de populație se realizează în acest caz prin *pompaj optic* între nivelele E_1 și E_3 ale Cr^{3+} , cu ajutorul radiației emise prin descărcare electrică în xenon (fig. 10.4.4, b), de $\lambda = 5\,600$ Å, urmate de tranziții neradiative între E_3 și E_2 , pînă cînd $N_2 > N_1$. Tranzițiile stimulate apar între E_2 și E_1 , cu $\lambda_{21} = 6\,943$ Å (în domeniul roșu al spectrului). Stimularea acestor tranziții se face prin intermediul radiației prezente între fețele semiargintate ale cristalului de rubin, care realizează un interferometru Fabry-Perot, acordat pe λ_{21} .

După același principiu funcționează și laserul cu sticlă de neodim (sticlă de wolframat de calciu, dopată cu Nd^{3+}), care în regim de impulsuri poate furniza puteri ridicate, cu perspectiva de a fi utilizate în fuziunea termonucleară (vezi § 12.1). În cazul laserilor cu joncțiune $p-n$ se folosesc materiale semiconductoare, radiația emisă apărând în urma unor recombinații între electroni de conducție și goluri. La aceste tipuri de laseri pompajul se realizează prin aplicarea unor tensiuni electrice joncțiunii $p-n$. Se folosesc, de regulă, compuși binari, cum sînt arseniura de galiu

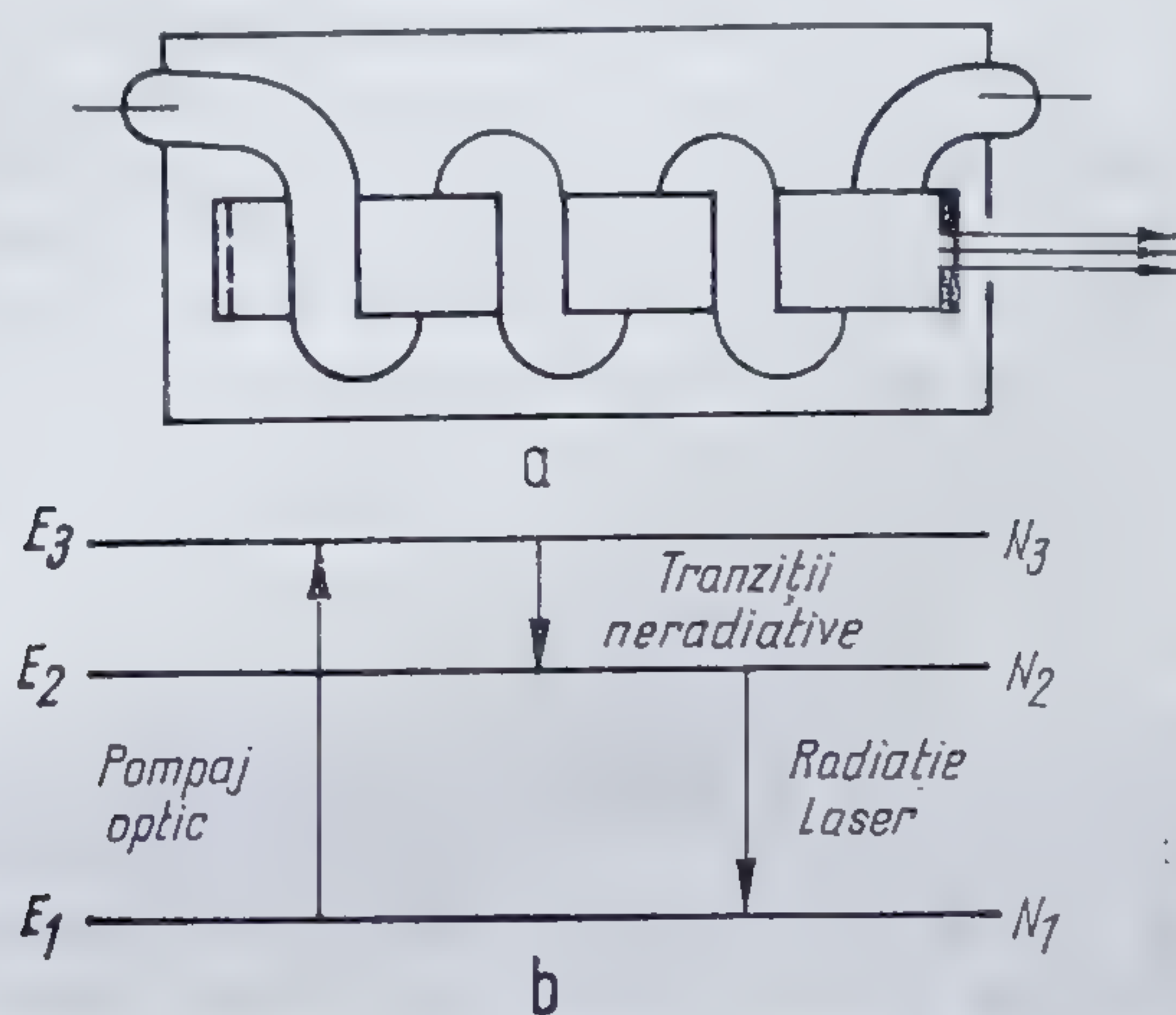


Fig. 10.4.4

(GaAs) pentru $\lambda = 8383 \text{ \AA}$, fosfura de galiu (GaP) pentru $\lambda = 6500 \text{ \AA}$ și stibiura de indiu (InSb) pentru $\lambda = 5,3 \text{ }\mu\text{m}$.

În anul 1961, Joran, Benett și Herriott realizează primul IRASER (Infrared Amplification by Stimulated Emission of Radiation) cu gaze. Un amestec de He—Ne ($p_{\text{He}}/p_{\text{Ne}} \simeq 10$) la presiunea de câțiva tori, este închis într-o incintă cu pereți reflectători și excitat printr-o descărcare electrică de înaltă frecvență. Se realizează astfel inversii de populație pentru atomii de Ne, în urma unor ciocniri, cu „transfer de excitație”, cu atomii de He. Stimularea emisiei se obține prin acordarea incintei Fabry-Perot, realizată cu pereți reflectători, pe $\lambda = 11530 \text{ \AA}$. Tot din această clasă fac parte și iraserii cu He—CO₂.

Astăzi există o gamă largă de dispozitive cu emisie stimulată de radiație [22, 95, 96, 97, 102]. Cele cu rubin lucrează cu puteri și randamente mici ($P = 1 - 3 \text{ mW}$; $\eta = 0,1\%$), dar emițind în domeniul vizibil o radiație cu monocromaticitate și coerență ridicate, au largi întrebuintări practice (de exemplu în holografie sau în interferometria holografică (vezi § 7.4)). Puteri și randamente mai mari ($P = 10 - 50 \text{ kW}$; $\eta = 15\%$) se obțin la iraserii cu gaze, iar cei cu joncțiune $p-n$ pot atinge $\eta = 50\%$, dar posedă o slabă monocromaticitate.

Radiațiile laser și-au găsit multiple utilizări practice (în holografie, transmiterea de informații, medicină, metalurgie, tehnică, construcții

etc. [20]). Țara noastră produce, începînd din anul 1962, o gamă largă de laseri și iraseri.

Există cercetări interesante privind efectele pe care le produce radiațiile laser, de puteri ridicate, la trecerea lor printr-un mediu. S-au obținut o serie de efecte neliniare, care sînt studiate de optica neliniară [29] (propagarea prin canale, procese de autofocalizare, excitări bi- și trifononice etc.).

Un alt aspect interesant al proceselor de emisie și de absorbție de către atomi și molecule a radiațiilor electromagnetice îl constituie prezența în aceste procese a *regulilor de selecție*. Aceste reguli au fost descoperite din cercetări de spectroscopie atomică și moleculară și ele stabilesc că nu toate tranzițiile atomice și moleculare sînt posibile. Teoria cuantică pune aceste reguli de selecție pe seama faptului că momentele de tranziție $\langle(p_{12})^2\rangle$, care definesc coeficienții de tranziție B_{12} , au, pentru anumite tranziții, valorile medii nule. Așa, de exemplu, pentru o tranziție între două stări de rotație și anume între o stare cu $r = 0$, pentru care $\psi_0 = 1$ și starea cu $r = 1$, pentru care $\psi_1 = \cos \theta$, se va obține $\langle(p_{01})^2\rangle = \int \psi_0^* (\hat{p}_{01}^2 \cos^2 \theta) \psi_1 dV = p_{01}^2 \int \cos^3 \theta \sin \theta d\theta = 4p_{01}^2/9 \neq 0$ și deci tranziția este permisă. În schimb, pentru tranziția între stările cu $r_0 = 0$ și $r_2 = 2$, cînd $\psi_2 = 3 \cos^2 \theta - 1$, calcule analoge dau $\langle(p_{02})^2\rangle = 0$. Deci o astfel de tranziție este interzisă și ea nu se va realiza efectiv. Din studii de acest fel rezultă că vor fi permise și deci vor fi însoțite de emisia sau absorbția unor fotoni de radiație electromagnetică numai acele tranziții pentru care sînt satisfăcute următoarele reguli de selecție

$$\begin{aligned} \Delta J &= 0, \pm 1; \quad \Delta L = \pm 1; \quad \Delta S = 0; \quad \Delta m_J = 0, \pm 1; \\ \Delta m_L &= 0, \pm 1; \quad \Delta m_S = 0. \end{aligned} \quad (10.4.30)$$

Avînd în vedere aceste reguli de selecție, seriile spectrale ale atomului de hidrogen, respectiv ale metalelor alcaline, vor apare în urma unor salturi de felul celor schițate în fig. 10.4.5. Desigur că fiecare linie dintr-un

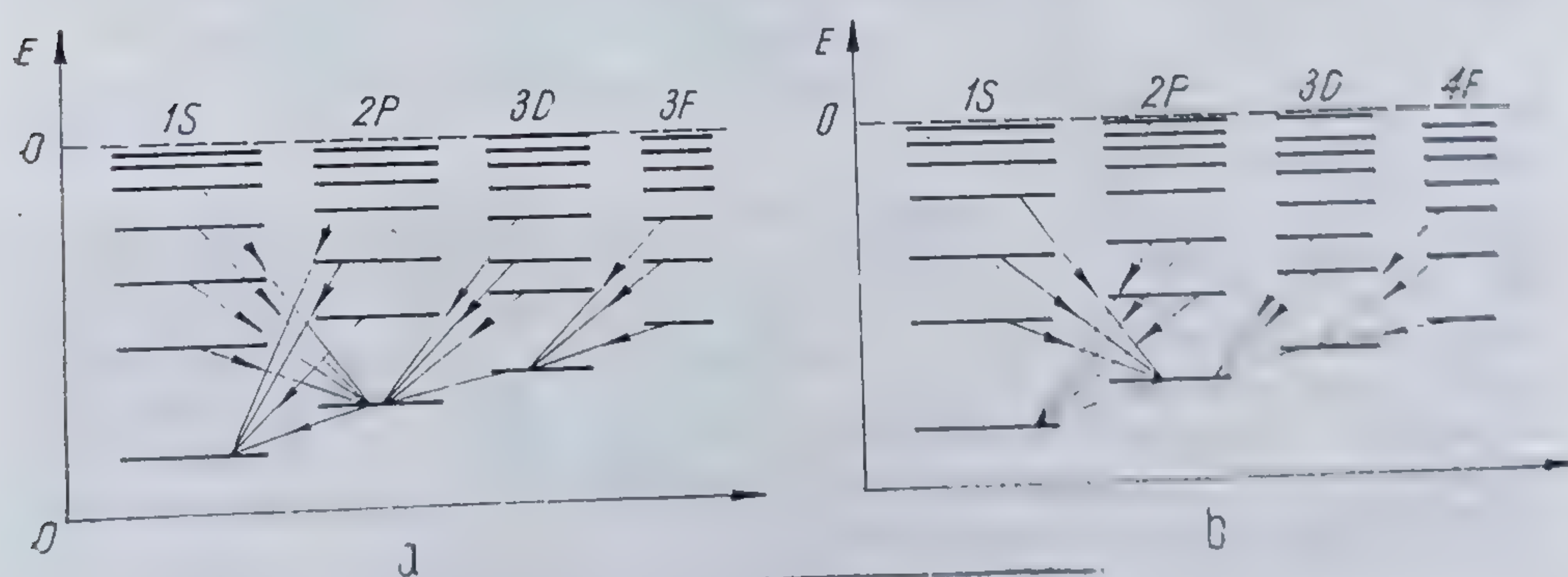


Fig. 10.4.5

spectru emis sau absorbit va prezenta o anumită lărgime, care este descrisă prin funcția de frecvență

$$\Gamma(\nu) = \frac{1}{2\pi} \Gamma(\omega). \quad (10.4.31)$$

O astfel de lărgime a liniei spectrale va fi produsă de diverse cauze, cum sînt: efectul Doppler (datorat agitației termice a atomilor și moleculelor), efectul unui câmp electric cristalin (dacă atomii sînt prinși într-o structură cristalină), saturarea nivelului excitat care poate limita tranzițiile de absorbție, ciocnirile cu alți atomi sau molecule care distrug procesele de tranziție etc. La acestea se mai adaugă și lărgimea naturală a liniei spectrale, determinată de lărgimea nivelului energetic excitat. De exemplu, efectul Doppler produce, în medii gazoase, o schimbare a frecvenței radiației cu valoarea.

$$\Delta\nu_0 = \nu \frac{\langle v \rangle}{c} = \left[\frac{2\nu^2 k_b T}{mc^2} \ln 2 \right]^{1/2} \quad (10.4.32)$$

m fiind masa respectivului atom sau moleculă.

Dacă lărgimea liniei spectrale este de forma unei linii clasice de rezonanță, exprimată prin relația (1.7.53), adică este de forma

$$\Gamma(\nu) = \frac{C_0}{(\nu - \nu_0)^2 + \Delta\nu^2} \quad (10.4.33)$$

C_0 — fiind o constantă, atunci respectiva linie se numește de tip *Lorentz*, iar dacă

$$\Gamma(\nu) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta_0} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta\nu}{\Delta_0}\right)^2} \quad (10.4.34)$$

Δ_0 fiind rădăcina pătrată a momentului de ordinul doi al liniei, definit prin expresia

$$M_2 = \frac{\int_0^\infty (\nu - \nu_0)^2 \Gamma(\nu) d\nu}{\int_0^\infty \Gamma(\nu) d\nu}, \quad (10.4.35)$$

atunci linia se numește de tip *Gauss*.

De reținut că stabilirea formei unei linii spectrale și determinarea lărgimii ei $\Delta\nu$ fac posibilă evaluarea unor parametri ai stării în care se găsesc atomii ce emit respectiva linie, cum este temperatura, viteza medie termică a atomilor, viteza surselor stelare, timpii de relaxare τ ai tranzițiilor etc.

O altă caracteristică a unei linii spectrale este reprezentată de intensitatea ei energetică I_e , definită potrivit relației (7.2.3), prin expresia

$$I_e = c \langle u \rangle \quad (10.4.36)$$

$\langle u \rangle$ fiind densitatea volumică de energie radiantă. Întrucît

$$\langle u \rangle = \frac{w_{2-1} \hbar \omega}{V} \quad (10.4.37)$$

cu (10.4.22), în care se înlocuiește $\rho(\omega) = \frac{\omega^2}{(2\pi c)^3}$ (vezi 10.4.22), rezultă

$$I_e = 2 \frac{\omega^4}{6\pi\epsilon_0 c^3} \langle |p_{21}|^2 \rangle = \frac{\omega^4}{3\pi\epsilon_0 c^3} \langle |p_{12}|^2 \rangle. \quad (10.4.38)$$

Aici s-a introdus un factor 2 datorită celor două stări de polarizare ale radiațiilor electromagnetice. De remarcat că rezultatul exprimat prin (10.4.38) este echivalent cu cel clasic, obținut din studiul radiației emise de un dipol electric (§6.10.2).

Dacă se ține seamă și de ponderile statistice diferite $g_1 \neq g_2$ ale celor două nivele E_1 și E_2 și se calculează momentul de tranziție $\langle (p_{12})^2 \rangle$, se obține o expresie de forma

$$I_e = A \frac{g_2}{g_1} e^{-(E_2-E_1)/k_b T} \quad (10.4.39)$$

A fiind o constantă ce depinde de numărul de atomi (concentrația) participanți la respectiva tranziție.

§ 10.5. CIOCNIRI ATOMICE. NOȚIUNI DE TEORIA CUANTICĂ A ÎMPRĂȘTIERII MICROPARTICULELOR

Studiul cuantic al ciocnirilor dintre două microparticule prezintă interes atît pentru fizica atomică și moleculară, cît mai ales pentru fizica nucleului și a particulelor elementare (§ 12.5 și § 12.10). În § 1.8 s-a arătat cum trebuie abordată clasic problema ciocnirilor, respectiv a difuziei unei particule într-un câmp de forțe centrale, generat de un centru fix. Pentru difuzia coulombiană a particulelor α în câmpul nuclear al atomului a fost obținută celebra formulă a lui Rutherford (1.8.29), a cărei verificare experimentală a constituit principalul argument în formularea modelului nuclear planetar al atomului.

Pentru elaborarea unui studiu cuantic al ciocnirilor vom presupune că o microparticulă, de masă proprie m_0 , realizează o ciocnire necentrală

cu un nucleu fix O , situat în originea unui sistem de referință inerțial (fig. 10.5.1). Pentru cazul când energia E a microparticulei care difuzează este mult mai mare decât energia de interacțiune $V(r)$ dintre cele două microparticule se poate admite că starea acesteia, presupusă liberă înainte de ciocnire, se schimbă puțin sub acțiunea perturbației $V(r)$. De aceea, vom descrie starea microparticulei înainte și după ciocnire prin funcții de undă de tipul (8.8.4), adică

$$\psi_k^{(0)} = \psi_0 e^{-ik \cdot r}, \quad \psi_{k'}^{(0)} = \psi'_0 e^{-ik' \cdot r}. \quad (10.5.1)$$

Aplicând metoda perturbațiilor cuantice (§ 8.10), vom calcula probabilitatea de tranziție din starea (k) în starea (k') , în ipoteza că

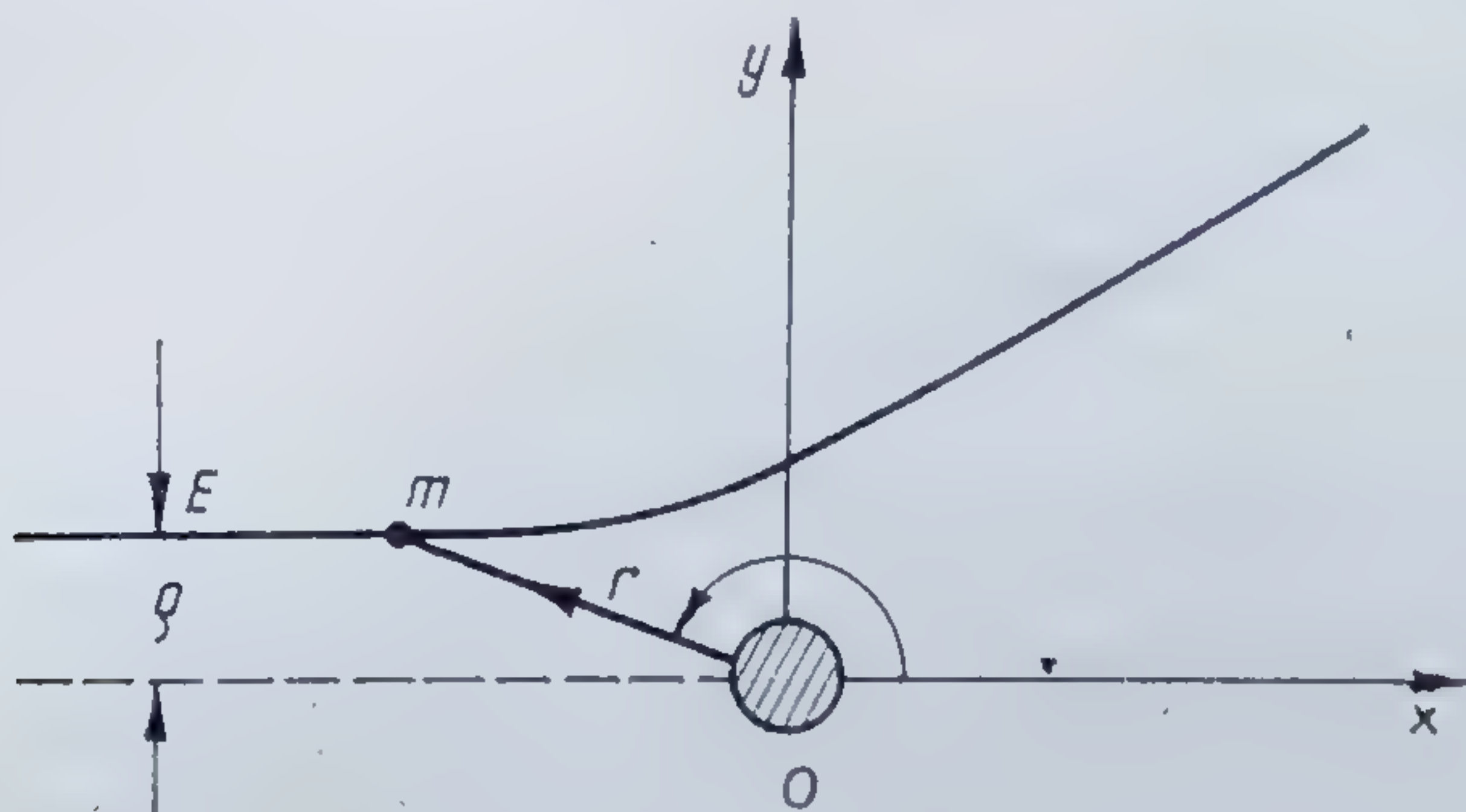


Fig. 10.5.1

$\hat{H}' = \hat{V}(r)$, $V(r)$ fiind atât de mic încât în calcule va fi suficientă aproximația de ordinul întâi, denumită și *aproximația Born*. Atunci, potrivit relației (8.10.52), vom putea scrie:

$$W_{k \rightarrow k'} = \frac{2\pi}{\hbar} \langle |H'(k, k')|^2 \rangle \delta_{kk'} \quad (10.5.2)$$

în care pentru o difuzie elastică, trebuie să luăm $|k| = |k'|$ și deci $\delta_{kk'} = 1$. Împărțind această probabilitate, $W_{k \rightarrow k'}$, la fluxul incident de particule, vom obține secțiunea diferențială de difuzie $d\sigma$, mărime definită în sensul celei introduse în §1.8. Fluxul incident cuantic va fi dat, potrivit relației (8.6.13), de expresia

$$\mathbf{J} = \frac{i\hbar}{2m_0} (\psi_k^* \nabla \psi_k - \psi_k \nabla \psi_k^*) \quad (10.5.3)$$

sau normînd funcția de undă ψ_k , pe un volum \mathcal{V} (cînd $|\psi_0|^2 = \mathcal{V}^{-1}$), de expresia:

$$|\mathbf{J}_i| = \frac{\hbar k}{2m_0 \mathcal{V}} = \frac{(2m_0)^{1/2}}{\mathcal{V}} E^{1/2}. \quad (10.5.4)$$

Desigur că va fi necesar să calculăm și o probabilitate de difuzie medie, avînd în vedere că distribuția stărilor se face cu o anumită densi-

tate de stări $\rho(E)$, dată de formula (8.8.33), stări cuprinse în unghiul solid $d\Omega$. Atunci :

$$d\sigma = \frac{2\pi}{h} \langle |H^{(1)}(k, k')|^2 \rangle \cdot \rho(E) \frac{d\Omega}{4\pi} = \frac{m_0^2}{4\pi^2 \hbar^4 \gamma^2} \langle |H^{(1)}(k, k')|^2 \rangle d\Omega \quad (10.5.5)$$

Cu funcții de undă de forma (10.5.1), momentele de tranziție se calculează ușor, rezultând

$$\langle |H^{(1)}(k', k')|^2 \rangle = \left[\int_{\mathcal{V}} \psi_{k'}^* V(r) \psi_k d\mathcal{V} \right]^2 = \gamma^2 \cdot V_{k', k}^2 \quad (10.5.6)$$

unde s-a folosit notația

$$V_{k', k} = \int_{(\mathcal{V})} e^{i(k-k') \cdot r} V(r) d\mathcal{V}. \quad (10.5.7)$$

Pentru secțiunea diferențială de difuzie se va obține formula

$$d\sigma = \frac{m_0^2}{4\pi^2 \hbar^4} |V_{k', k}|^2 d\Omega \quad (10.5.8)$$

cunoscută sub denumirea de *formulă a lui Born*.

Cu ajutorul acestei formule se pot calcula secțiunile eficace pentru diverse tipuri de ciocniri (vezi și §12.5), dacă se cunosc expresiile funcției $V(r)$. Vom exemplifica un astfel de calcul pentru difuzia coulombiană a particulelor α în câmpul electrostatic al nucleului [5]. În acest caz

$$V(r) = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (10.5.9)$$

Folosind coordonatele polare (r, θ, φ) vom obține

$$d\sigma = \frac{m_e^2}{4\pi \hbar^4} \left[\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty e^{i|k-k'|r \cos \theta} \left(\frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right)^2 r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi \right]^2. \quad (10.5.10)$$

Având în vedere că :

$$\int_0^\pi e^{i|k-k'|r \cos \theta} d(\cos \theta) = \frac{1}{i|k-k'|r} (e^{i|k-k'|r} - e^{-i|k-k'|r}) = \frac{2}{|k-k'|r} \sin(|k-k'|r) \quad (10.5.11)$$

atunci pentru difuzii elastice, când $k = k'$ și

$$|k - k'| = (k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \theta)^{1/2} = (2k^2 - 2k^2 \cos \theta)^{1/2} = 2k \sin \theta/2 \quad (10.5.12)$$

se va obține :

$$d\sigma = \frac{m_0^2 Z^2 e^4}{16\pi^4 \epsilon_0^2 \hbar^4 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \left[\int_0^\infty \sin \left(2kr \sin \frac{\theta}{2} \right) dr \right]^2. \quad (10.5.13)$$

Integrala din paranteză se calculează ușor, întrucât

$$\int_0^\infty \sin \left(2kr \sin \frac{\theta}{2} \right) dr = \frac{1}{2k \sin \frac{\theta}{2}} \int_0^\infty \sin y \, dy = \frac{1}{2k \sin \frac{\theta}{2}}$$

și punînd $p = \hbar k = m_0 v$, după cîteva transformări simple, se obține

$$d\sigma = \left(\frac{Ze^2}{8\pi^2 \epsilon_0 m_0 v^2} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \theta/2}. \quad (10.5.14)$$

Acest rezultat este cunoscut ca *formula lui Rutherford*.

Deșigur, calculele efectuate mai sus sînt corecte numai în cazurile în care aproximația lui Born (10.5.8) este acceptabilă. Pentru a stabili domeniul de valabilitate al acestei aproximații, vom admite că particula α se apropie de nucleu pînă la o distanță minimă r_{min} , parametrul de ciocnire fiind ρ (fig. 10.5.1). Estimînd momentul cinetic al particulei clasic, prin $m_\alpha v_\alpha \rho$ și cuantic, prin $\hbar \sqrt{l(l+1)} \simeq \hbar l$, pentru $l \gg 1$ vom obține

$$\rho = \frac{\hbar l}{m_\alpha v}. \quad (10.5.15)$$

Din relația de nedeterminare $\Delta p \Delta v \geq \hbar$, cu $\Delta p = F \Delta t$, unde $F = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_{min}^2}$

și $\Delta t = \frac{2\rho}{v}$, respectiv $\frac{1}{2} m_\alpha v^2 = \frac{2Ze^2}{\rho}$, rezultă :

$$\Delta p = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_{min}^2} \cdot \frac{2\rho}{v} = \frac{Ze^2}{\pi\epsilon_0 r_{min}^2} = \frac{\hbar}{\Delta r}; \quad \text{cu } r_{min} = \rho \quad (10.5.16)$$

sau

$$\left(\frac{\Delta r}{r} \right)_{min} = \frac{137 v}{4Zc}. \quad (10.5.17)$$

în care prin $\alpha = \frac{1}{137}$ s-a notat constanta structurii fine. Rezultă deci

că $\left(\frac{\Delta r}{r} \right)_{min}$ va fi foarte mic, dacă

$$\frac{4Zc\alpha}{v} \gg 1. \quad (10.5.18)$$

§ 10.6. ATOMUL ÎN CÂMPURI MAGNETICE ȘI ELECTRICE STAȚIONARE

Efectul acțiunii asupra atomilor a câmpurilor magnetice intense și omogene, de inducție \mathbf{B} constantă în timp, a fost pus în evidență încă din anul 1896 de către Zeeman, fiind cunoscut sub denumirea de *efect Zeeman*. Acest efect a jucat un rol deosebit în dezvoltarea fizicii cuantice, împreună cu un alt efect similar care apare în câmp electric constant, denumit *efect Stark* și descoperit în anul 1913.

Efectul Zeeman constă în despicarea liniilor spectrale emise de către o sursă de lumină aflată într-un câmp magnetic intens \mathbf{B} , în trei componente pe direcția transversală la \mathbf{B} și în două componente pe direcția paralelă cu \mathbf{B} (vezi fig. 10.6.1). Ulterior s-a constatat că în câmpuri magnetice de intensități slabe se obțin mai multe componente Zeeman pe ambele direcții de observație. Din cauză că la vremea respectivă efectul, descoperit pentru câmpuri magnetice intense și denumit *efect Zeeman normal*, a putut fi explicat de către Lorentz în cadrul unei teorii electronice clasice, pe baza *precesiei Larmor* (6.5.31), despicărilor spectrale în câmpuri magnetice slabe li s-a dat denumirea de *efect Zeeman anomal*, teoria lui putându-se constitui numai în cadrul mecanicii cuantice.

În ceea ce privește efectul Stark, și acesta constă în despicări ale liniilor spectrale emise de către atomii aflați în stări cu $L \neq 0$ și în prezența unor câmpuri electrostatice \mathbf{E} puternice. Se constată că deplasarea

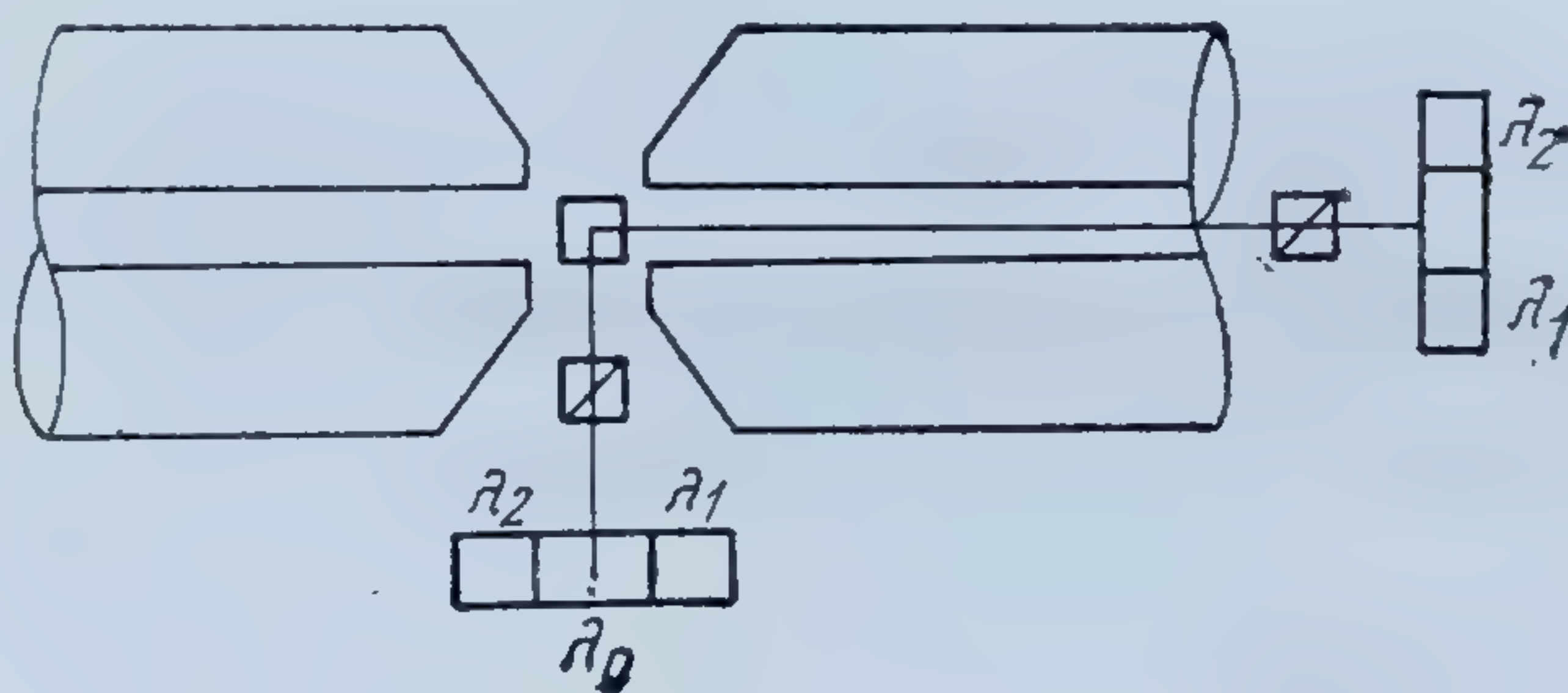


Fig. 10.6.1

Stark $\Delta\nu$ este proporțională cu $|\mathbf{E}|$, dacă $|\mathbf{E}| < 10^2$ V/m, respectiv cu $|\mathbf{E}|^2$, dacă $|\mathbf{E}| > 10^6$ V/m. Apar, în general, mai multe componente Stark, de intensități diferite, efectul Stark fiind mult mai complex decât efectul Zeeman. Numărul acestor componente scade însă cu creșterea lui \mathbf{E} , efectul dispărând odată cu autoionizarea atomului.

Cu toate că ambele efecte au jucat un rol deosebit de important în dezvoltarea fizicii cuantice, aici va fi expusă succint numai teoria efectului Zeeman pentru atomi hidrogenoizi.

Potrivit expresiilor clasice (6.5.25) și (6.8.80) ale hamiltonianului unei sarcini în câmpul generat de nucleu, vom scrie operatorul hamiltonian

al unui atom hidrogenoid, într-un câmp de inducție magnetică \mathbf{B} , sub forma

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} (\hat{\mathbf{p}} - e\hat{\mathbf{A}})^2 - \mu_s \cdot \mathbf{B} + V(\mathbf{r}) \quad (10.6.1)$$

în care s-a adăugat și contribuția energiei magnetice a spinului (penultimul termen).

În anul 1916 a fost pusă în evidență *anomalia magnetică de spin*, prin celebra experiență Einstein - de Haas [23], care a arătat că $\gamma_s = 2\gamma_l$, și deci

$$\hat{\mu}_s = \frac{e}{m_e} \hat{\mathbf{L}}_s \quad (10.6.2)$$

Pentru un câmp magnetic omogen este valabilă relația (6.5.2) și astfel vom putea scrie

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{1}{2} (\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{r}}). \quad (10.6.3)$$

Înlocuind aceste rezultate în (10.6.1), prin calcule simple, avînd în vedere că $(\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}} (\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{r}}) = \mathbf{B}(\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}) = \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{L}}_l$ se obține:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} \hat{\mathbf{p}}^2 + V(\mathbf{r}) - \frac{e}{2m_e} (\hat{\mathbf{L}}_l + 2\hat{\mathbf{L}}_s) \cdot \mathbf{B} + \frac{e^2}{8m_e} (\mathbf{B} \times \mathbf{r})^2 \quad (10.6.4)$$

Contribuția ultimului termen din această expresie este mică în comparație cu a celorlalți, ea fiind sesizabilă numai în câmpuri de intensități \mathbf{B} extrem de ridicate și permițînd explicarea așa-numitului efect Paschen-Back [10] și, de aceea, el poate fi omis în studiul efectului Zeeman.

Atunci

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} \hat{\mathbf{p}}^2 + V(\mathbf{r}) - \frac{e}{2m_e} (\hat{\mathbf{L}}_l + 2\hat{\mathbf{L}}_s) \cdot \mathbf{B}. \quad (10.6.5)$$

Valorile proprii ale acestui operator, obținute din ecuația $\hat{H} \psi = E\psi$, vor fi date de expresia

$$E = E_n - \frac{e}{2m_e} (\langle \mathbf{L}_l \rangle + 2\langle \mathbf{L}_s \rangle) \cdot \mathbf{B} \quad (10.6.6)$$

respectiv cu (8.8.123) și (8.11.21)

$$E_{n m_L m_S} = E_n - \mu_B B (m_L + 2m_S) \quad (10.6.7)$$

Aici prin μ_B s-a notat expresia cuantei de moment magnetic electronic

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 0,92837 \cdot 10^{-23} \text{ J/T} \quad (10.6.8)$$

denumită *magneton Bohr-Procopiu*.

Se observă că, pe baza rezultatului (10.6.7), se poate explica imediat efectul Zeeman normal. În prezența cîmpului de inducție magnetică \mathbf{B} fiecare nivel energetic se descompune în mai multe subnivele, denumite *subnivele Zeeman* (fig. 10.6.2), astfel încît tranzițiile cu emisii de fotoni vor avea loc între aceste subnivele, fiind permise numai acele tranziții pentru care :

$$\Delta m_l = \pm 1; \quad \Delta m_s = 0. \quad (10.6.9)$$

Vor apărea, prin urmare, numai trei componente spectrale, așa cum se arată pe figura 10.6.2, dar pe direcția paralelă cu \mathbf{B} nu apare componenta

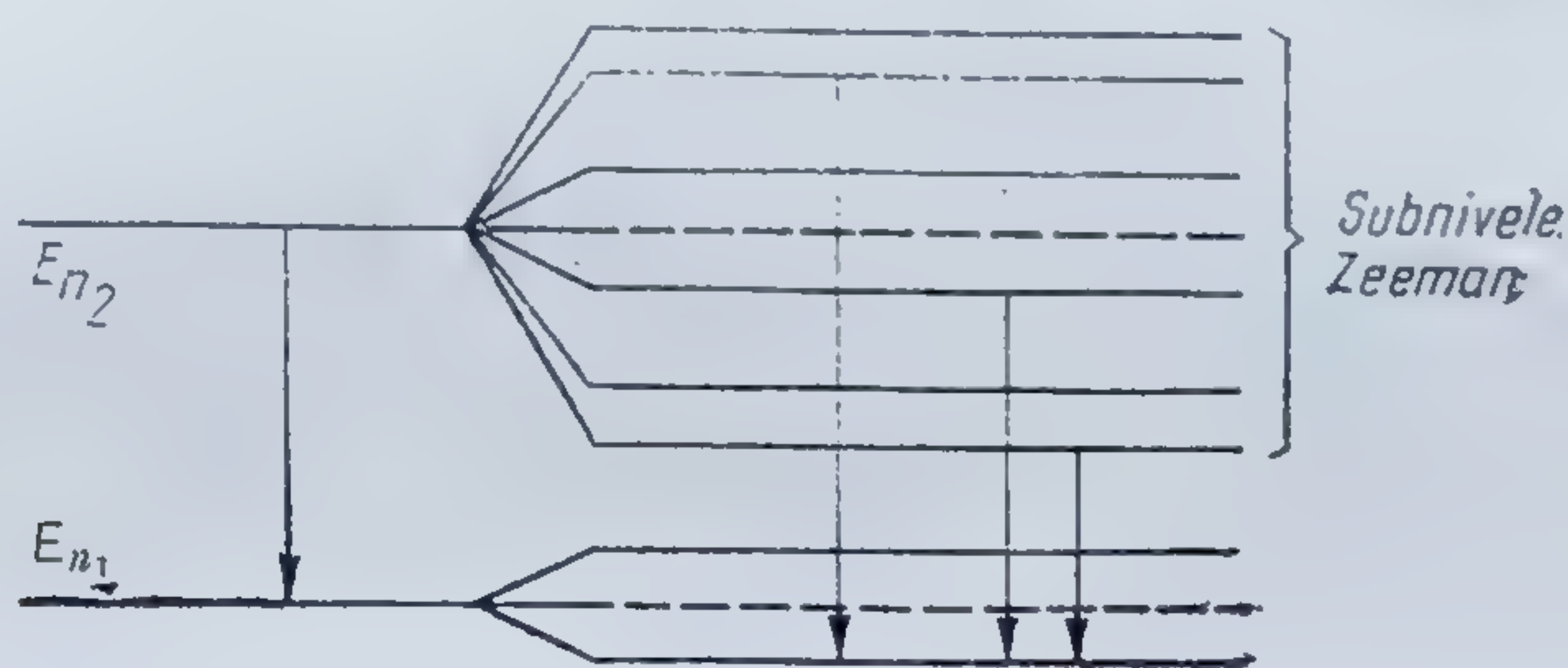


Fig. 10.6.2

λ_0 , datorită faptului că un dipol electric oscilant nu emite radiație în lungul direcției sale (vezi §6.10.2).

Studiul expus mai sus poate fi ușor extins la cazul atomilor cu mai mulți electroni, folosind modelul vectorial al atomului, expus în §.10.3. În acest scop se va înlocui suma vectorială a momentelor cinetice orbitale și de spin cu momentul cinetic intern sau total

$$\mathbf{L}_J = \mathbf{L}_L + \mathbf{L}_S \quad (10.6.10)$$

și se va ține cont că valorile cuantificate ale acestor momente sînt date de expresiile

$$\langle L_J \rangle = h\sqrt{J(J+1)}; \quad \langle L_L \rangle = h\sqrt{L(L+1)}; \quad \langle L_S \rangle = h\sqrt{S(S+1)} \quad (10.6.11)$$

numerele cuantice J , L și S obținîndu-se prin însumarea vectorială a numerelor l și s , așa cum s-a precizat în §10.3.

Dar prezența anomaliei magnetice de spin conduce la concluzia că momentul magnetic intern, $\langle \mu'_J \rangle = \langle \mu_L \rangle + \langle \mu_S \rangle$, nu mai este colinar și antiparalel cu $\langle \mathbf{L}_J \rangle$, (fig. 10.6.3). De aceea, în locul sumei $\langle \mu'_J \rangle$ vom folosi proiecția sa $\langle \mu_J \rangle$ pe direcția lui $\langle \mathbf{L}_J \rangle$, care se exprimă sub forma

$$\langle \mu_J \rangle = \frac{(\langle \mu'_J \rangle \langle \mathbf{L}_L \rangle) \langle \mathbf{L}_J \rangle}{|\langle \mathbf{L}_J \rangle|^2} \quad (10.6.12)$$

Dar

$$\langle \mu'_J \rangle = \mu_B \langle \mathbf{L}_L \rangle + 2\mu_B \langle \mathbf{L}_S \rangle \quad (10.6.13)$$

și deci

$$\langle \mu_J \rangle = \frac{\mu_B (\langle \mathbf{L}_L \rangle + 2\langle \mathbf{L}_S \rangle) \langle \mathbf{L}_J \rangle}{|\langle \mathbf{L}_J \rangle|^2} \langle \mathbf{L}_J \rangle = \mu_B g_J \langle \mathbf{L}_J \rangle \quad (10.6.14)$$

unde prin g_J s-a notat așa-numitul *factor Landé* sau *factor de despicare spectroscopică*, dat de expresia :

$$g_J = \frac{\langle \mathbf{L}_L \rangle \langle \mathbf{L}_J \rangle + 2\langle \mathbf{L}_S \rangle \langle \mathbf{L}_J \rangle}{|\langle \mathbf{L}_J \rangle|^2}. \quad (10.6.15)$$

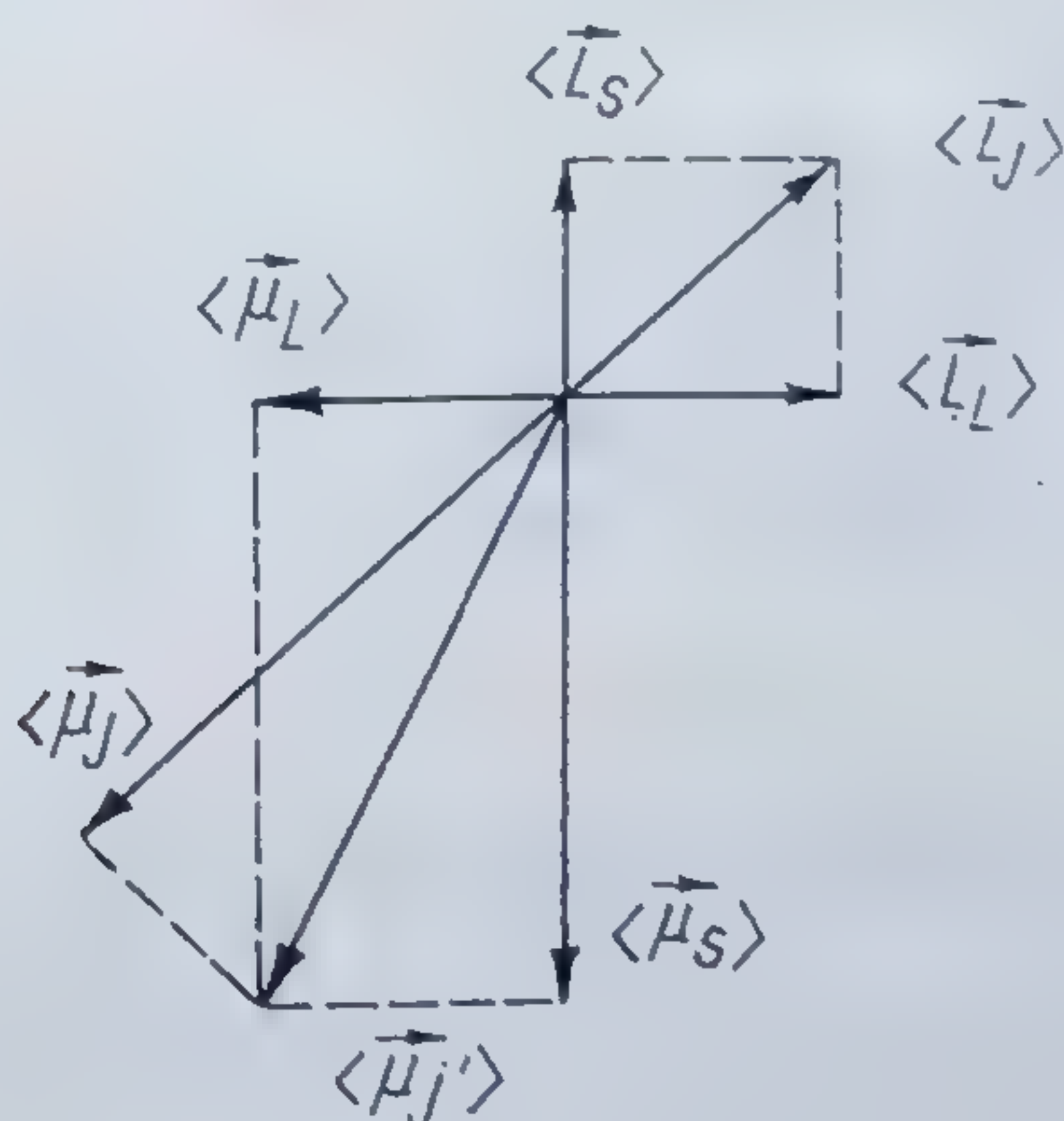


Fig. 10.6.3

De remarcat că se poate scrie :

$$\begin{aligned} g_J &= \frac{\langle \mathbf{L}_L \rangle (\langle \mathbf{L}_L \rangle + \langle \mathbf{L}_S \rangle) + 2\langle \mathbf{L}_S \rangle (\langle \mathbf{L}_L \rangle + \langle \mathbf{L}_S \rangle)}{\langle \mathbf{L}_J^2 \rangle} = \\ &= \frac{\langle L_L^2 \rangle + \langle L_S^2 \rangle + 3\langle \mathbf{L}_L \rangle \langle \mathbf{L}_S \rangle}{\langle L_J^2 \rangle} \end{aligned}$$

din care, cu $\langle \mathbf{L}_L \rangle \langle \mathbf{L}_S \rangle = \frac{1}{2} [\langle L_J^2 \rangle - \langle L_L^2 \rangle - \langle L_S^2 \rangle]$ și înlocuind valorile date de (10.6.11), rezultă :

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (10.6.16)$$

(se vede că $g_L = 1$ și $g_s = 2$, așa cum s-a menționat în §.10.3).

Desigur că, ținând cont de aceste rezultate, în locul expresiei (10.6.7) va trebui să luăm

$$E_{n,m_J} = E_n - \mu_B \cdot B g_J m_J. \quad (10.6.17)$$

Se observă că fiecare nivel de energie E_n se despică în $(2J+1)$ sub-nivele Zeeman, în prezența unui câmp de inducție B , ridicându-se astfel

degenerarea acestor nivele după numărul cuantic magnetic intern m_j . Între aceste subnivele pot interveni tranziții cu emisie de radiație, de frecvență

$$\nu_{n, m_j} = \nu_n + \frac{\mu_B B}{h} (g_{J_2} m_{J_2} - g_{J_1} m_{J_1}). \quad (10.6.18)$$

Vor fi desigur permise numai tranzițiile pentru care $\Delta m_j = 0, \pm 1$, în conformitate cu regulile de selecție (10.6.9). Experiența arată că aceste rezultate sînt în strictă concordanță cu datele experimentale oferite de efectul Zeeman anomal.

Este interesant de subliniat că tranziții cu emisie sau absorbție de cuante de radiație electromagnetică pot interveni și între subnivelele Zeeman de spin care aparțin aceluiași nivel energetic, așa cum au arătat experiențele începute de către Zavoisky, în anul 1946. În acest caz, tranzițiile permise (fig. 10.6.4) sînt selectate de următoarea regulă de selecție :

$$\Delta m_s = \pm 1 \quad (10.6.19)$$

iar frecvența cuantei absorbite se obține din expresia

$$h\nu_r = g_s \mu_B B \Delta m_s = g_s \mu_B B. \quad (10.6.20)$$

Deci :

$$\nu_r = \gamma_l B \quad (10.6.21)$$

γ_l fiind raportul giromagnetic electronic. Pentru cîmpuri magnetice, de inducție obișnuite ($B \simeq 0,1$ T), frecvența de rezonanță ν_r , corespunzătoare acestor tranziții, este de ordinul a 10^9 Hz și face parte din gama

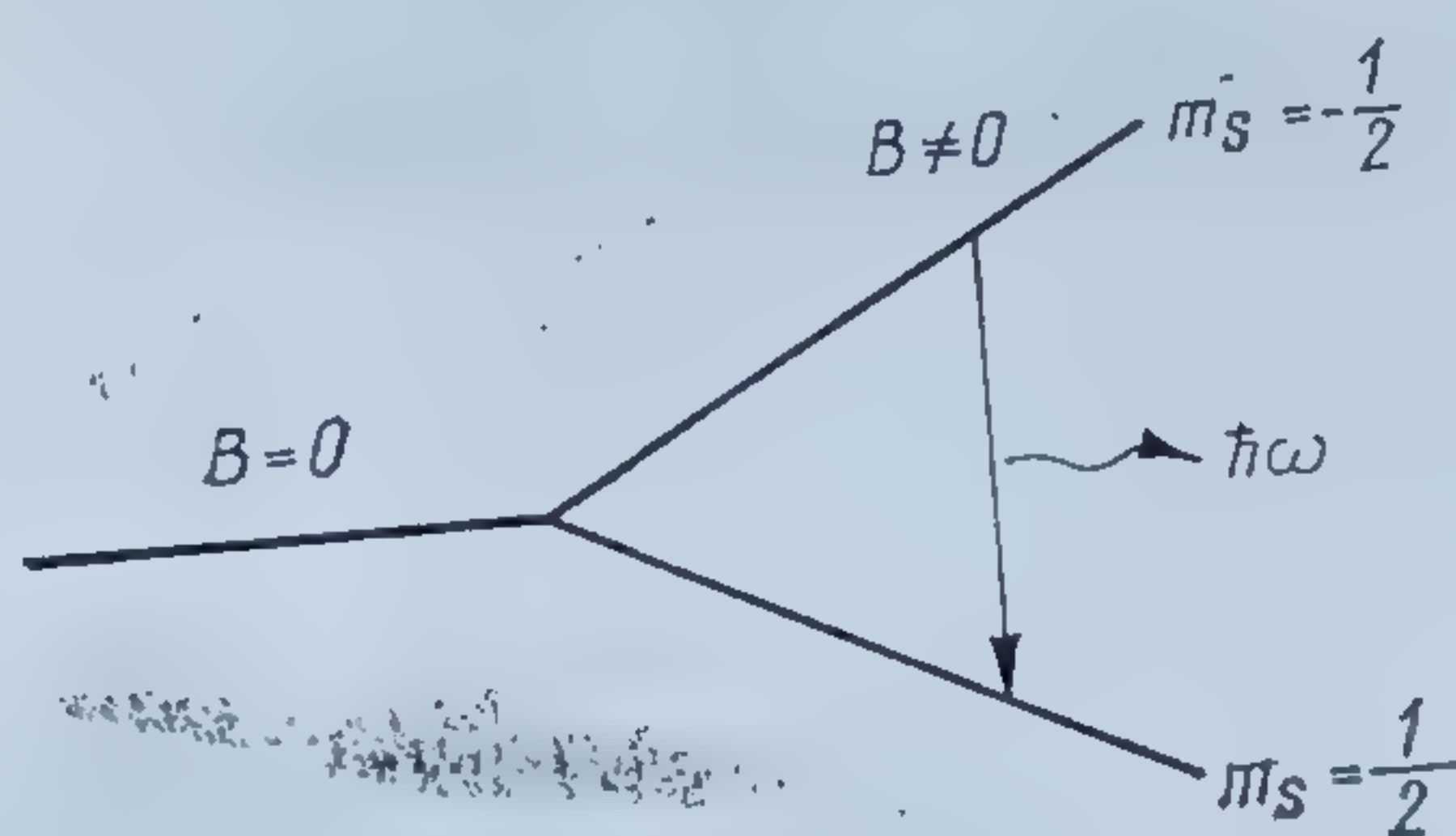


Fig. 10.6.4

microundelor. De aceea, dacă un sistem de atomi, care posedă un spin total $S \neq 0$, se găsește sub acțiunea concomitentă a două cîmpuri magnetice orientate reciproc perpendicular și anume unul de inducție B staționar și altul de inducție $b = b_0 e^{2\pi i \nu_r t}$, variabil periodic în timp, atunci se va produce o *absorbție rezonantă de energie* de la cîmpul b . Acest fenomen a primit numele de *rezonanță magnetică de spin* (putînd

fi obținută atât pentru sisteme paramagnetice electronice sau nucleare (RPE și RMN), cât și pentru sisteme cu ordonare magnetică electronică (rezonanță feromagnetică, RFM și rezonanță antiferomagnetică, RAFM) [124, 136]. În figura 10.6.5 este schițat un aranjament experimental pentru realizarea unei absorbții de rezonanță magnetică de spin, metoda fiind deosebit de precisă în studiul unor probleme de fizică moleculară, fizică atomică sau nucleară [124, 125]. Această tehnică oferă informații

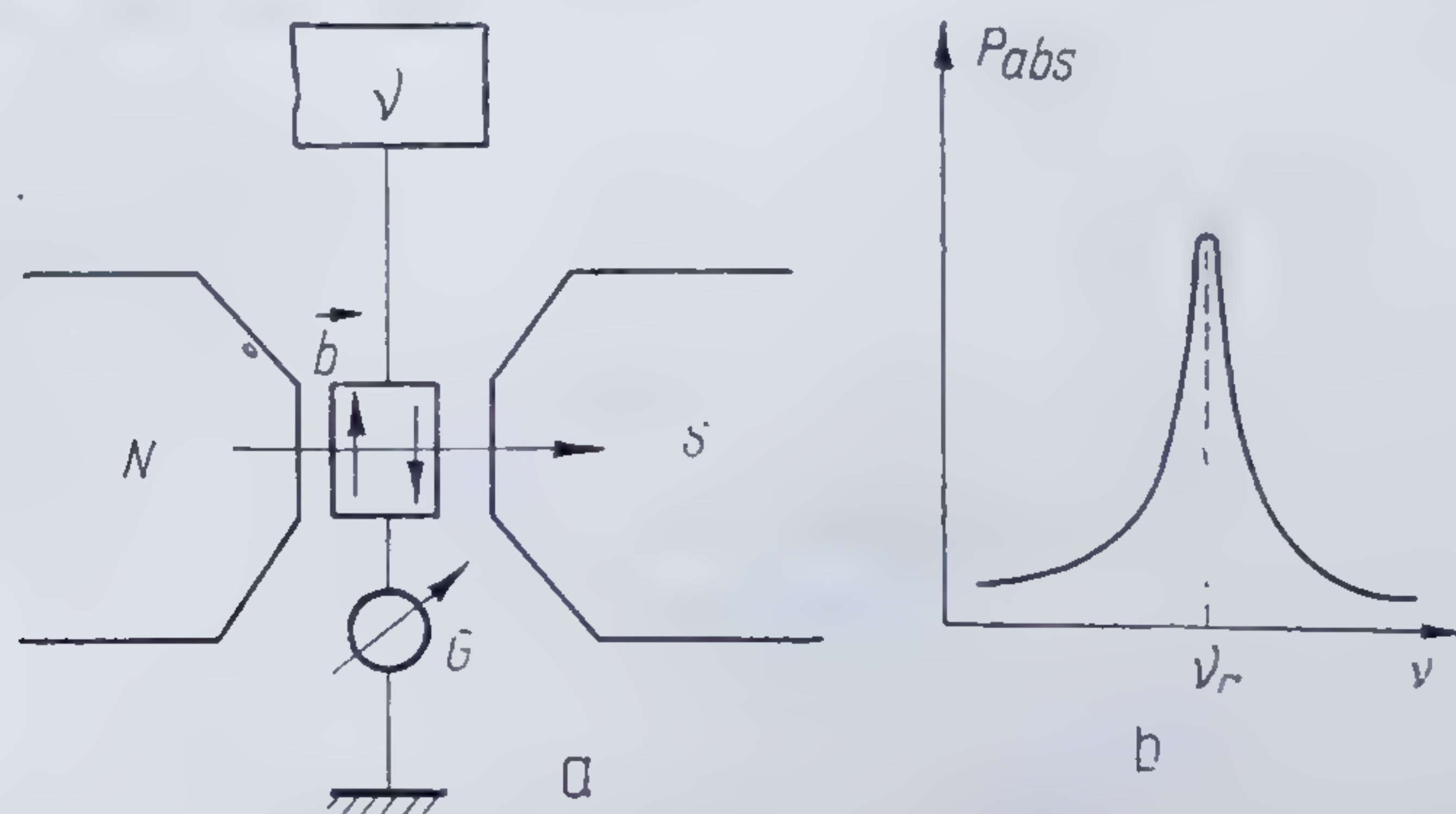


Fig. 10.6.5

prețioase asupra comportării în regim dinamic a spinilor (atomici și nucleari), permițînd studiul interacțiilor magnetice dintre aceștia, respectiv dintre cuantele undelor de spin (denumite magnoni) și alte microparticule și corpusculi, atât în sisteme condensate (solide și lichide), cât și în fază gazoasă. Problematika complexă și deosebit de fertilă a fenomenelor de rezonanță magnetică electronică este expusă în monografiile de largă referință ale acad. Ioan Ursu [124, 125].

§ 10.7. TEORIA CUANTICĂ A MOLECULEI. FORȚELE DE SCHIMB

Teoria cuantică a moleculei este mai complexă decît teoria cuantică a atomului datorită multiplelor interacții ce intervin între electroni și nuclee, interacții care complică extrem de mult forma ecuației lui Schrödinger. Există mai multe metode aproximative de a obține soluții ale acestei ecuații, una dintre ele obținîndu-se pe baza ipotezei că nucleele diversilor atomi din moleculă — a căror masă (deci, inerție) este mult mai mare decît a electronului — sînt în repaus în raport cu un sistem de referință inerțial (aproximația adiabatică Bohr-Oppenheimer). În cadrul unei astfel de aproximații vom prezenta un studiu cuantic al moleculei de hidrogen (H_2), care prezintă interes mai ales pentru faptul că conduce la eviden-

țierea unui nou tip de interacție (de natură electromagnetică) specifică lumii microcosmice și anume *interacția de schimb*.

Se știe că legarea unui proton de atomul de hidrogen este posibilă, determinînd formarea ionului de H_2^+ . Se constată că în acest ion, al moleculei H_2 , cei doi protoni se mențin la o distanță de $1,06\text{\AA}$, sub acțiunea unicului electron pe care-l posedă și care realizează un orbital sferic de tip s. Desigur, în cazul moleculei neutre H_2 , lucrurile trebuie să se complice, întrucît intervin în plus interacții coulombiene și interacții spin-orbită între

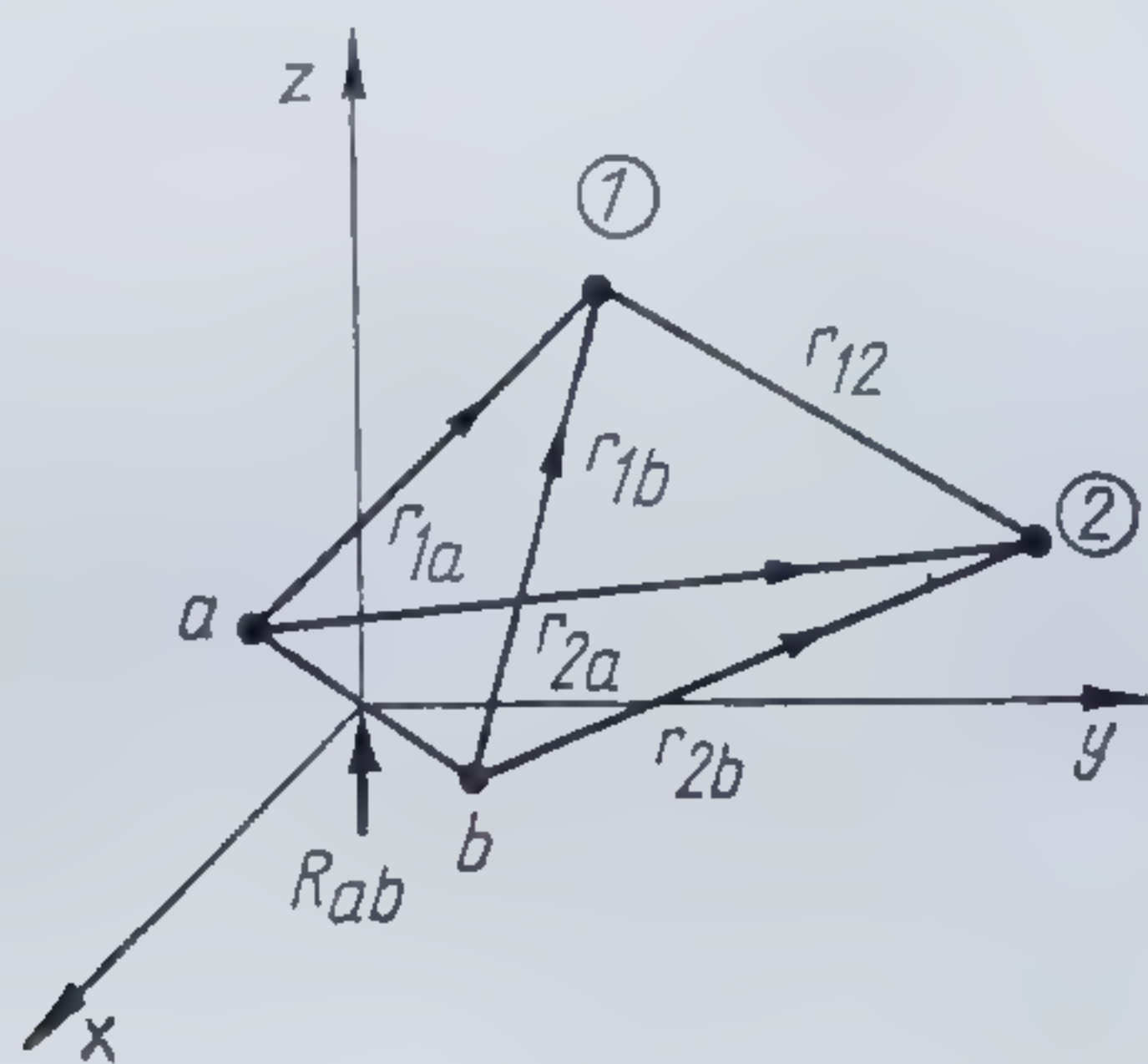


Fig. 10.7.1

patru microparticule, sistemul cuantic fiind constituit acum din doi protoni „a” și „b” și doi electroni „1” și „2” (fig. 10.7.1). Starea cuantică staționară a moleculei de hidrogen va fi descrisă de o ecuație atemporală Schrödinger, de forma

$$\Delta\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left[E - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{R_{ab}} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1a}} - \frac{1}{r_{2b}} - \frac{1}{r_{2a}} - \frac{1}{r_{1b}} \right) \right] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0 \quad (10.7.1)$$

Una dintre primele metode de rezolvare a acestei ecuații a fost formulată de către Heitler și London, în anul 1928. Această metodă se bazează pe ideea de a construi o funcție de undă $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, care descrie starea cuantică a celor doi electroni din moleculă H_2 , cu ajutorul funcțiilor de undă unielectronice atomice, $\psi_a(\mathbf{r}_{1a})$ și $\psi_b(\mathbf{r}_{2b})$, date de ecuații de forma

$$\begin{aligned} \Delta\psi_a(\mathbf{r}_{1a}) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{1a}} \right) \psi_a(\mathbf{r}_{1a}) &= 0; \\ \Delta\psi_b(\mathbf{r}_{2b}) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{2b}} \right) \psi_b(\mathbf{r}_{2b}) &= 0. \end{aligned} \quad (10.7.2)$$

Admițînd că în cadrul moleculei H_2 intervin interacții slabe între cei doi atomi de H și neglijînd, pentru început, interacția spin-orbită, în conformitate cu metoda separării variabilelor se poate lua

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_a(\mathbf{r}_{1a}) \cdot \psi_b(\mathbf{r}_{2b}) \quad (10.7.3)$$

în care s-a admis că electronul ① aparține protonului a , iar electronul ② protonului b . Cei doi electroni fiind însă identici, se poate la fel de bine spune că electronul ① aparține protonului b și electronul ② protonului a , astfel încât și funcția

$$\psi_{II}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = \psi_a(\mathbf{r}_{2a}) \psi_b(\mathbf{r}_{1b}) \quad (10.7.4)$$

va descrie aceeași stare cuantică a moleculei de H_2 . Atunci pe baza principiului de superpoziție, vom lua

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C_I \psi_I(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + C_{II} \psi_{II}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \quad (10.7.5)$$

Dacă se calculează, cu ajutorul unei astfel de funcții de undă, energia E a moleculei, folosind expresia :

$$E = \frac{\int \psi^* \hat{H} \psi d\mathcal{V}_1 d\mathcal{V}_2}{\int \psi^* \psi d\mathcal{V}_1 d\mathcal{V}_2} \quad (10.7.6)$$

în care

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} (\Delta_1 + \Delta_2) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{R_{ab}} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1a}} - \frac{1}{r_{2b}} - \frac{1}{r_{2a}} - \frac{1}{r_{1b}} \right) \quad (10.7.7)$$

atunci, din condiția de minim pentru starea staționară, adică din

$$\frac{\partial E}{\partial C_{I,II}} = 0 \quad (10.7.8)$$

se obține $C_I = \pm C_{II}$, astfel încât molecula de H_2 se va putea găsi în două stări cuantice, descrise de funcțiile :

$$\begin{aligned} \psi_+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \psi_I + \psi_{II} = \psi_a(\mathbf{r}_{1a}) \psi_b(\mathbf{r}_{2b}) + \psi_a(\mathbf{r}_{2a}) \psi_b(\mathbf{r}_{1b}) \\ \psi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \psi_I - \psi_{II} = \psi_a(\mathbf{r}_{1a}) \psi_b(\mathbf{r}_{2b}) - \psi_a(\mathbf{r}_{2a}) \psi_b(\mathbf{r}_{1b}). \end{aligned} \quad (10.7.9)$$

Aceste stări le corespund, potrivit relației (10.7.6), următoarele valori energetice :

$$E_{\pm} = 2E_0 + \frac{V \pm U}{1 \pm S_{ab}} \quad (10.7.10)$$

în care

$$S_{ab} = \int \psi_a^*(\mathbf{r}_{1a}) \psi_b(\mathbf{r}_{2b}) d\mathcal{V}_1 d\mathcal{V}_2 \quad (10.7.11)$$

este așa-numita *integrală de acoperire*,

$$\begin{aligned} V &= \int |\psi_I|^2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{R_{ab}} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1b}} - \frac{1}{r_{2a}} \right) d\mathcal{V}_1 d\mathcal{V}_2 = \\ &= \int |\psi_{II}|^2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{R_{ab}} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1a}} - \frac{1}{r_{2b}} \right) d\mathcal{V}_1 d\mathcal{V}_2 \end{aligned} \quad (10.7.10)$$

este energia coulombiană, iar

$$U = \int \psi_{II}^* \psi_I \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{R_{ab}} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1a}} - \frac{1}{r_{1b}} \right) d\mathcal{V}_1 d\mathcal{V}_2 \quad (10.7.13)$$

este integrală de schimb.

În fig. 10.7.2 este redată grafic dependența valorilor lui E_+ și E_- pentru cele două stări, în funcție de distanța R_{ab} dintre cei doi protoni ai moleculei. Se observă că numai starea cu E_+ corespunde unui echilibru stabil pentru molecula de H_2 , întrucât numai această stare prezintă un

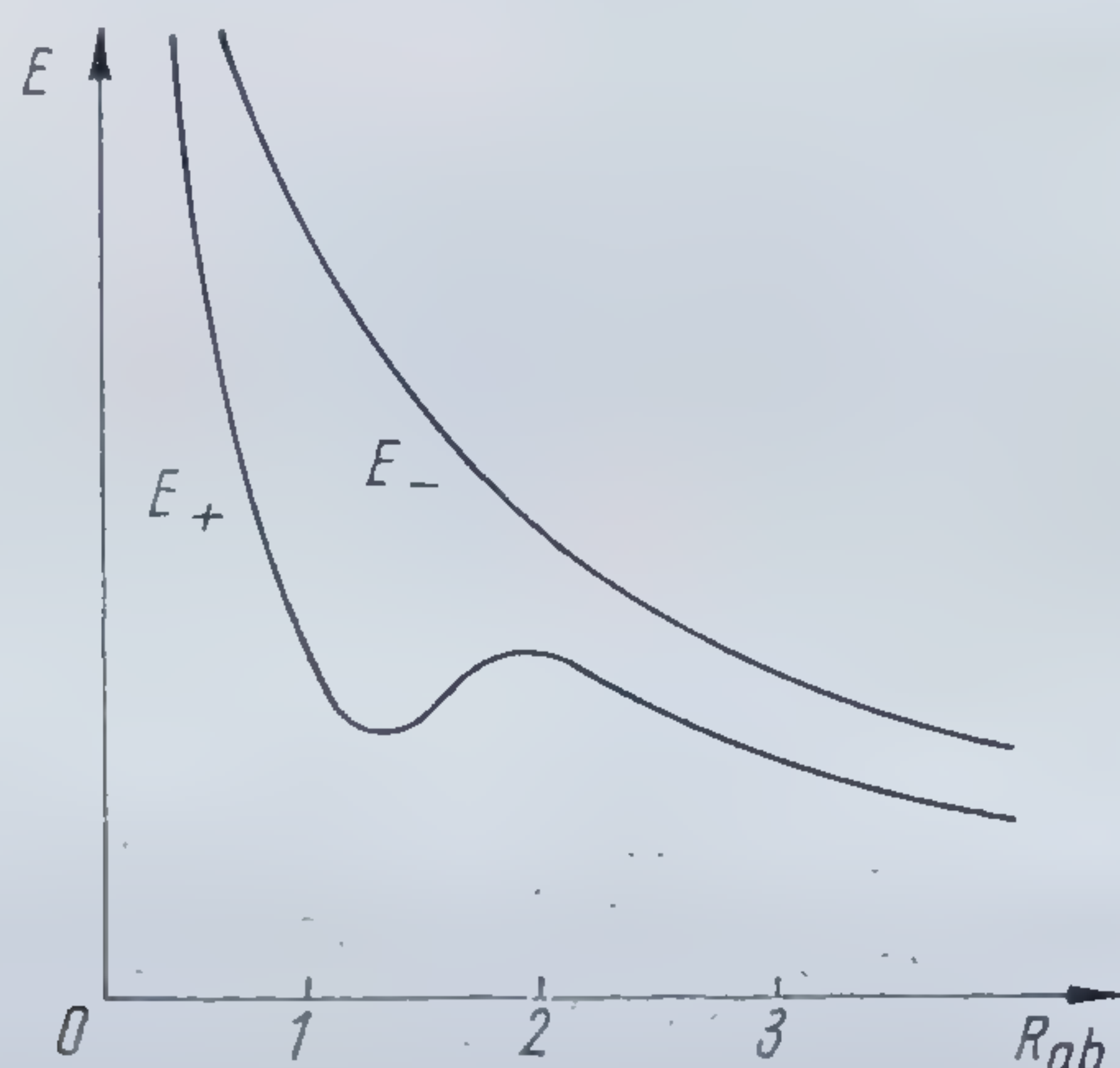


Fig. 10.7.2

minim, pentru $R_{ab} \simeq 1,06 \text{ \AA}$. De remarcat că energia E_+ corespunde unei stări de singlet, în care cei doi spini electronici sînt orientați antiparalel ($S=0$), iar energia E_- corespunde unei stări de triplet ($S=1$) în care spinii electronici sînt orientați paralel și în același sens. Într-adevăr, presupunînd că interacția spin-orbită este foarte slabă și luînd funcțiile unielectronice de forma (8.11.28), atunci în conformitate cu (9.4.20), vom avea pentru un sistem de doi electroni care interacționează slab între ei

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_a(\mathbf{r}_1)\chi_a(s_z) & \psi_a(\mathbf{r}_2)\chi_a(s_z) \\ \psi_b(\mathbf{r}_1)\chi_b(s_z) & \psi_b(\mathbf{r}_2)\chi_b(s_z) \end{vmatrix}. \quad (10.7.14)$$

Dar, întrucît $s_z = \pm 1/2$, înseamnă că față de o direcție Oz , spinii celor doi electroni pot fi amîndoi paraleli cu această direcție sau numai unul dintre ei, deci spinii celor doi electroni pot fi între ei paraleli sau antiparaleli. Din această cauză există mai multe posibilități de combinare a funcțiilor de spin $\chi(s_z)$, cu cele spațiale $\psi(\mathbf{r})$.

Pentru a stabili acest număr, vom introduce în locul lui $\chi(s_z)$ alte două funcții de spin $\alpha(s_z)$ și $\beta(s_z)$, definite în felul următor:

$$\alpha(s_z) = \alpha(1/2) = 1; \quad \alpha(-1/2) = 0; \quad \beta(1/2) = 0; \quad \beta(-1/2) = 1. \quad (10.7.15)$$

Se observă că aceste funcții satisfac condiții de ortonormare de forma :

$$\sum_{s_z=\pm 1/2} |\alpha(s_z)|^2 = \sum_{s_z=\pm 1/2} |\beta(s_z)|^2 = 1; \quad \sum_{s_z=\pm 1/2} \alpha(s_z)\beta(s_z) = 0. \quad (10.7.16)$$

Atunci, în locul expresiei (10.7.14), vom putea lua funcțiile

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_a(\mathbf{r}_1)\alpha(s_{z_1}) & \psi_a(\mathbf{r}_2)\alpha(s_{z_2}) \\ \psi_b(\mathbf{r}_1)\alpha(s_{z_1}) & \psi_b(\mathbf{r}_2)\alpha(s_{z_2}) \end{vmatrix}; \quad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_a(\mathbf{r}_1)\beta(s_{z_1}) & \psi_a(\mathbf{r}_2)\beta(s_{z_2}) \\ \psi_b(\mathbf{r}_1)\beta(s_{z_1}) & \psi_b(\mathbf{r}_2)\beta(s_{z_2}) \end{vmatrix} \quad (10.7.17)$$

$$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_a(\mathbf{r}_1)\alpha(s_{z_1}) & \psi_a(\mathbf{r}_2)\alpha(s_{z_2}) \\ \psi_b(\mathbf{r}_1)\beta(s_{z_1}) & \psi_b(\mathbf{r}_2)\beta(s_{z_2}) \end{vmatrix}; \quad \psi_4 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_a(\mathbf{r}_1)\beta(s_{z_1}) & \psi_a(\mathbf{r}_2)\beta(s_{z_2}) \\ \psi_b(\mathbf{r}_1)\alpha(s_{z_1}) & \psi_b(\mathbf{r}_2)\alpha(s_{z_2}) \end{vmatrix}$$

Se constată ușor că funcțiile ψ_1 , ψ_2 și $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_3 + \psi_4)$ sînt de forma funcției $\psi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, dată de (10.7.9), adică ele pot fi scrise sub forma $\frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) - \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)]$, deoarece au ca factori comuni funcții de

spin de forma $\alpha(s_{z_1})\alpha(s_{z_2})$; $\beta(s_{z_1})\beta(s_{z_2})$ și $\frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(s_{z_1})\beta(s_{z_1}) - \alpha(s_{z_2})\beta(s_{z_1})]$.

Acestea au valoarea unu, dacă spinii celor doi electroni sînt paraleli între ei. Prin urmare, starea de triplet, cu $s = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$, a moleculei

de hidrogen este triplu degenerată și ea nu asigură un echilibru stabil respectivei molecule (E nu prezintă minime funcție de R_{ab} , așa cum se poate vedea pe fig. 10.7.2).

În schimb, funcția de undă $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_3 - \psi_4)$ este de forma funcției

$\psi_+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ din (10.7.9), ea putînd fi scrisă sub forma $\frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) + \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)]$ pentru cazul cînd spinii celor doi electroni sînt antiparaleli.

În acest caz avem o stare de singlet nedegenerată, pentru care $S = \frac{1}{2} -$

$\frac{1}{2} = 0$, molecula de H_2 aflîndu-se în această stare în condiții de echi-

libru stabil, întrucît E_+ prezintă un minim pentru $R_{ab} = 1,06 \text{ \AA}$.

Experimental, au fost depistate ambele stări pentru molecula de H_2 , stările singlet ale așa-zisului *parahidrogen* fiind mult mai frecvente decît stările-triplet ale *ortohidrogenului* (la $T = 20 \text{ K}$, 99,7 % din molecule sînt de parahidrogen).

De remarcă și faptul că cele două stări sînt distanțate între ele energetic cu valoarea (vezi 10.7.3)

$$\Delta E_s = E_- - E_+ = 2 \frac{VS_{ab}^2 - U}{1 - S_{ab}^4}. \quad (10.7.18)$$

Această diferență apare numai ca urmare a simplei inversări a unuia dintre cei doi spini electronici din molecula de H_2 și, de aceea, ea a primit denumirea de *energie de schimb*.

De obicei, energia de schimb se exprimă printr-un hamiltonian de schimb H_s , definit prin expresia

$$H_s = \Delta E_s = -J_{12} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (10.7.19)$$

în care \mathbf{S}_1 și \mathbf{S}_2 sînt numerele cuantice de spin (vectoriale) ale celor doi parteneri de interacție, iar J_{12} este o constantă care poartă denumirea de *integrală de schimb*.

Se observă că în cazul cînd acești parteneri sînt electronii din molecula H_2 , pentru care $|\mathbf{S}_1| = |\mathbf{S}_2| = 1/2$, se poate scrie :

$\mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 = \frac{1}{2} (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 - \frac{3}{4}$, și deci pentru starea triplet ($S_1 + S_2 = 1$) rezultă :

$$E_+ \simeq H_s = \frac{3}{4} J_{12} \quad (10.7.20)$$

iar pentru starea singlet ($S_1 + S_2 = 0$)

$$E_- \simeq H_s = -\frac{1}{4} J_{12}. \quad (10.7.21)$$

Din compararea ultimelor două relații cu (10.7.18), se obține

$$J_{12} = -2 \frac{VS_{ab}^2 - U}{1 - S_{ab}^4} \quad (10.7.22)$$

sau, întrucît se poate lua aproximativ $U \simeq S_{ab}^2$,

$$J_{12} \simeq -2 \frac{U(V - 1)}{1 - U^2}. \quad (10.7.23)$$

Avînd în vedere că energia coulombiană, așa cum a fost definită prin (10.7.12), este întotdeauna pozitivă ($V > 0$), iar energia de schimb U poate fi atît pozitivă cît și negativă, funcție de r_1 și r_2 , rezultă că integrala de schimb J_{12} poate fi atît pozitivă cît și negativă. Atunci cînd $r_1 \simeq r_2$ (respectiv $r_{1a} \simeq r_{2b}$ sau $r_{2a} \simeq r_{1b}$) energia de schimb U se apropie ca valoare de energia coulombiană V (adică $U \simeq V$) și deci integrala de schimb J_{12} va fi negativă $\left(J_{12} = -2 \frac{U}{1 + V} < 0 \right)$. Dar, energia coulombiană V crește o dată cu scăderea lui r_1 și r_2 , iar energia de schimb U devine negativă atunci cînd funcțiile ψ_I și ψ_{II} au semne opuse, respectiv cînd $r_1 \neq r_2$ și r_{12} are valori relativ mari. În aceste situații, integrala de schimb J_{12} devine pozitivă.

De notat că ambele stări se realizează efectiv în natură, moleculei de H_2 în starea de parahidrogen corespunzîndu-i $J_{12} > 0$, iar în starea de

ortohidrogen, respectiv în stările sistemelor cu ordonare de tip feromagnetic, $J_{12} < 0$ (§11.6). Din (10.7.19) rezultă că în sistemele pentru care $J_{12} < 0$ în starea fundamentală, spinii partenerilor de interacție se orientează paralel între ei și în același sens.

Trebuie notat, de asemenea, că metoda Heitler-London, expusă succint mai sus este valabilă numai pentru cazul când distanța R_{ab} dintre nucleele atomilor ce formează molecula este relativ mare, în așa fel încât să se poată neglija interacția coulombiană dintre aceste nuclee. La distanțe R_{ab} mai mici, respectiva aproximație nu mai rămâne valabilă și, de aceea, au fost create alte metode aproximative pentru rezolvarea acestor cazuri.

Una dintre aceste metode presupune că primul electron din molecula de H_2^+ se găsește în câmpul potențial coulombian al propriului său nucleu și într-un câmp coulombian mediu, creat de electronul 2, deci

$$V(\mathbf{r}_1) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{|\psi_2(\mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathcal{V}_2 \quad (10.7.24)$$

În caz general, se admite că unul dintre electronii moleculei se găsește concomitent în câmpul potențial al propriului nucleu și într-un câmp potențial mediu, numit *câmp selfconsistent*, creat de restul electronilor din moleculă. De aceea, ecuația Schrödinger (10.7.1) va trebui scrisă sub forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j \neq i}^n \frac{|\psi_j(\mathbf{r}_j)|^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} d\mathcal{V}_j \right] \psi_i(\mathbf{r}_i) = E_i \psi_i(\mathbf{r}_i). \quad (10.7.25)$$

O astfel de ecuație integro-diferențială este cunoscută sub denumirea de *ecuație Hartree*. Soluții ale acestei ecuații se pot obține, pentru sisteme nu prea complicate, prin metode numerice.

Desigur, metoda Hartree este destul de greoaie și, de aceea, au fost create metode mai simple, una dintre cele mai des folosite în teoria cuantică a moleculei fiind *metoda orbitalilor moleculari*. În această metodă, funcția de undă corespunzătoare unui anumit orbital molecular se aproximează printr-o combinație liniară de funcții de undă corespunzătoare orbitalilor atomici. Orbitalii moleculari se selectează după *numărul cuantic orbital molecular* Λ , care cuantifică proiecția momentului cinetic orbital pe axa moleculei. Acest număr poate lua numai valori întregi:

$$\Lambda = 0, 1, 2, \dots \quad (10.7.26)$$

orbitalii numindu-se și în acest caz orbitali de tip $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi, \Gamma, \dots$. La o astfel de notare se adaugă, ca și la atom, paritatea P și spinul S al moleculei, ultimul determinând multiplicitatea spectrală, $(2S + 1)$, a termenilor spectrali moleculari. De aceea, acești termeni se vor nota prin simbolul

$$^{2S+1}\Lambda^P \quad (10.7.27)$$

(uneori pentru funcții pare se folosește și notația $p = g$ (gerade), iar pentru funcții impare, $i = u$ (ungerade)).

Dacă se notează prin ψ_m funcția de undă corespunzătoare unui orbital molecular și prin φ_a , funcția de undă a orbitalului atomic, atunci, potrivit metodei orbitalilor moleculari, se ia

$$\psi_m = \sum_{a=1}^n C_{ma} \varphi_a \quad (10.7.28)$$

în care coeficienții C_{ma} exprimă proporția în care diverșii orbitali atomici intră în formarea respectivului orbital molecular. Se aleg numai acele combinații liniare de funcții atomice care rămân invariante față de operațiile de simetrie specifice respectivei molecule.

Așa, de exemplu, în cazul etilenei (C_2H_2), vor fi selectați numai orbitalii atomici care rămân invariante față de o rotație cu 2π și respectiv cu π în jurul unei axe normale la axa AB a moleculei și care trece prin centrul ei de greutate (molecula $H_2C=CH_2$, fiind de forma liniară $AO=OB$). Cu ajutorul teoriei grupurilor (vezi § 11.2) se poate stabili ușor că există numai următoarele două combinații de funcții de undă sferice normate care să rămână invariante față de rotația cu 2π și respectiv cu π

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_A + \varphi_B); \quad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_A - \varphi_B). \quad (10.7.29)$$

Cu funcții de undă de forma (10.7.29) se calculează ușor energia moleculei

$$\langle E \rangle = \frac{\int \psi_m^* \hat{H} \psi_m d\mathcal{V}}{\int |\psi_m|^2 d\mathcal{V}} = \frac{\int (\sum_a C_a \varphi_a)^* \hat{H} (\sum_a C_a \varphi_a) d\mathcal{V}}{\int (\sum_a C_a \varphi_a)^2 d\mathcal{V}} \quad (10.7.30)$$

a cărei valoare devine minimă, atunci când

$$\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial C_a} = 0. \quad (10.7.31)$$

Se observă că, cu notația

$$\langle H_{ab} \rangle = \int \varphi_a^* \hat{H} \varphi_b d\mathcal{V} \quad (10.7.32)$$

și folosind orbitali atomici ortonormați

$$\int \varphi_a^* \varphi_b d\mathcal{V} = \delta_{ab}, \quad (10.7.33)$$

expresia (10.7.30) primește forma

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_a \sum_b C_a C_b \langle H_{ab} \rangle}{\sum_a \sum_b C_a C_b}. \quad (10.7.34)$$

Prin diferențierea acestei expresii în raport cu un C_x se va obține următorul sistem de ecuații liniare

$$\langle E \rangle \sum C_b \delta_{ax} + \langle E \rangle \sum C_a \delta_{ax} = \sum C_b \langle H_{xb} \rangle + \sum C_a \langle H_{ax} \rangle.$$

Dar $\langle H_{ax} \rangle = \langle H_{xa} \rangle$, așa încât expresia de mai sus se reduce la forma

$$\sum_a [C_a (\langle H_{aa} \rangle - \langle E \rangle \delta_{aa})] = 0. \quad (10.7.35)$$

Se observă că o astfel de expresie reprezintă un sistem liniar și omogen de ecuații în $\langle H_{ax} \rangle$, care este compatibil numai dacă determinantul său principal Δ este nul, adică

$$\Delta = \begin{vmatrix} \langle H_{11} \rangle - \langle E \rangle & \langle H_{12} \rangle & \dots & \langle H_{1n} \rangle \\ \langle H_{21} \rangle & \langle H_{22} \rangle - \langle E \rangle & \dots & \langle H_{2n} \rangle \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \langle H_{n1} \rangle & \langle H_{n2} \rangle & \dots & \langle H_{nn} \rangle - \langle E \rangle \end{vmatrix} = 0 \quad (10.7.36)$$

În acest determinant, termenii $\langle H_{aa} \rangle$, reprezintă integrale coulombiene de forma (10.7.12), iar termenii $\langle H_{ab} \rangle$ reprezintă integrale de schimb, de forma (10.7.13). Admițând că toate integralele coulombiene, ca și cele de schimb sînt respectiv egale între ele, dar sînt nenule numai pentru primii vecini și nule pentru restul vecinilor, adică

$$\begin{aligned} \langle H_{11} \rangle &= \langle H_{22} \rangle = \dots = \langle H_{nn} \rangle = \alpha \\ \langle H_{12} \rangle &= \langle H_{23} \rangle = \langle H_{n-1,n} \rangle = \beta \\ \langle H_{13} \rangle &= \langle H_{31} \rangle = \dots = \langle H_{n,n+k} \rangle = 0 \end{aligned} \quad (10.7.37)$$

atunci, introducînd notația

$$z = \frac{\beta - \langle E \rangle}{\beta}, \quad (10.7.38)$$

determinantul (10.7.36) va lua forma :

$$\begin{vmatrix} z & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & z & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & z \end{vmatrix} = 0. \quad (10.7.39)$$

Prin dezvoltarea acestui determinant se obține un *polinom secular* de gradul n în z , de forma

$$z^n + A_1 z^{n-1} + A_2 z^{n-2} + \dots + A_n = 0 \quad (10.7.40)$$

care posedă un număr n de soluții $x_m = \gamma_m (m = 1, 2, \dots, n)$. Vor exista deci n valori cuantificate pentru energia moleculei și anume

$$\langle E \rangle_m = \alpha + r_m \beta; \quad m = 1, 2, \dots, n \quad (10.7.41)$$

De exemplu, în cazul simplu al etilenei, menționat mai sus, avem

$$\begin{vmatrix} z & 1 \\ 1 & z \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow z^2 - 1 = 0; \quad z_{12} = \pm 1$$

și deci

$$\langle E \rangle = \langle H_{11} \rangle \pm \langle H_{12} \rangle. \quad (10.7.42)$$

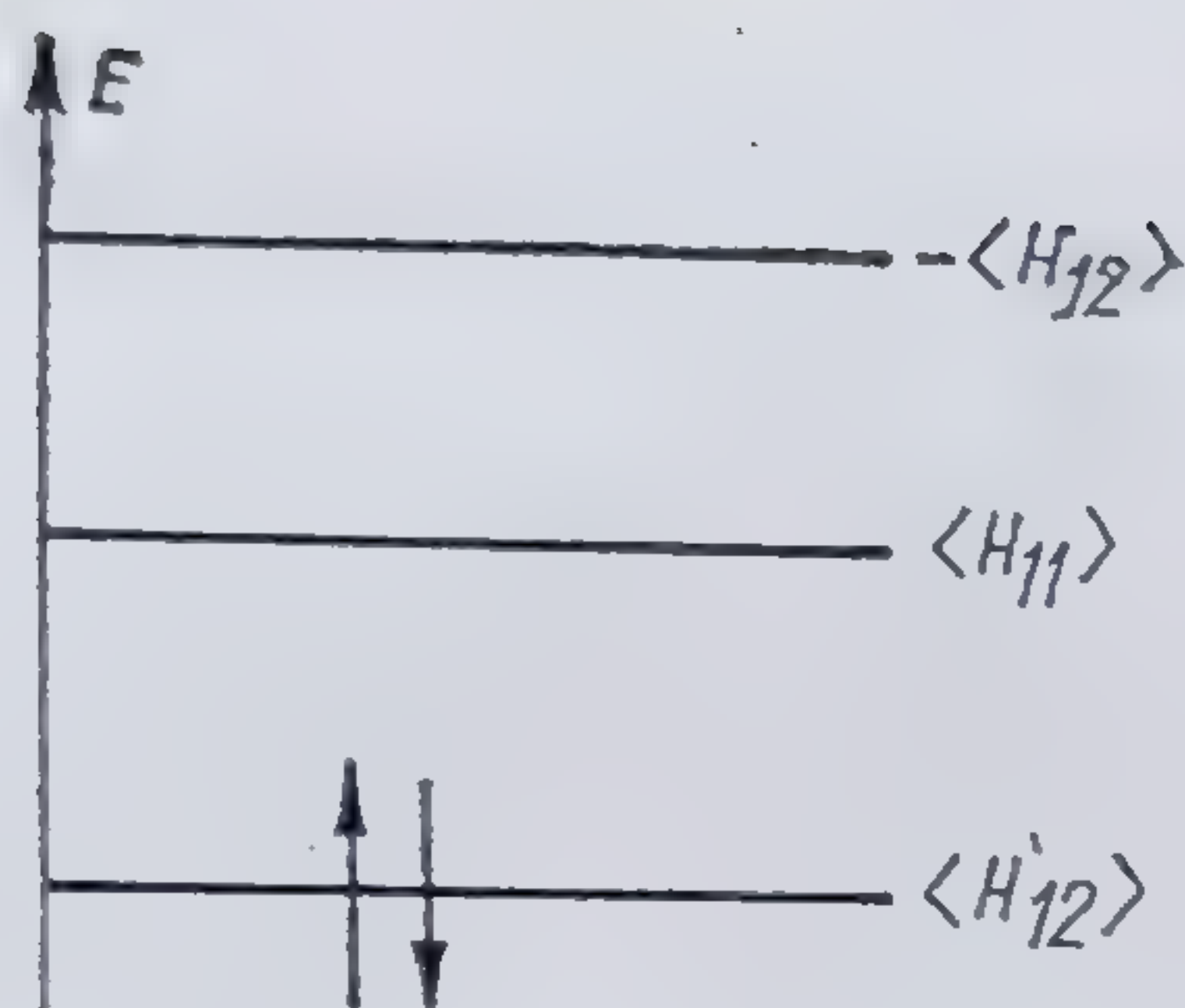


Fig. 10.7.3.

Se observă că dacă prin $2 \langle H_{11} \rangle$ se înțelege energia celor doi electroni $2p$ aparținând celor doi atomi de carbon, presupuși separați în molecula $\text{HC} \equiv \text{CH}$, atunci termenul $2 \langle H_{12} \rangle$ va exprima energia de legătură a moleculei de etilenă (fig. 10.7.3). Cei doi electroni vor popula, desigur, nivelul energetic inferior ($2 \langle H_{11} \rangle - 2 \langle H_{12} \rangle$), molecula găsindu-se într-o stare de singlet ($S = 0$).

Pe baza rezultatelor de mai sus s-a dezvoltat o *teorie a valențelor chimice*, potrivit căreia măsura tăriei legăturilor de

valență este dată de gradul de acoperire reciprocă a orbitalilor atomici ai atomilor ce constituie respectiva moleculă. Înseamnă că măsura tăriei acestor legături de valență va fi dată de integrala de acoperire S_{ab} , definită prin (10.7.11). De aceea, va fi imposibil de realizat o legătură $s - p$ de forma celei schițate în figura 10.7.4, a, întrucât în acest caz $S_{ab} = 0$. În schimb, vor fi posibile legături de forma $s - p$ și $p - p$, schițate în fig. 10.7.4, b, tăria legăturilor de tip $p_\sigma - p_\sigma$ fiind mai mică decât a celor de tip $p_\pi - p_\pi$, deoarece $S_{ab}^\sigma < S_{ab}^\pi$.

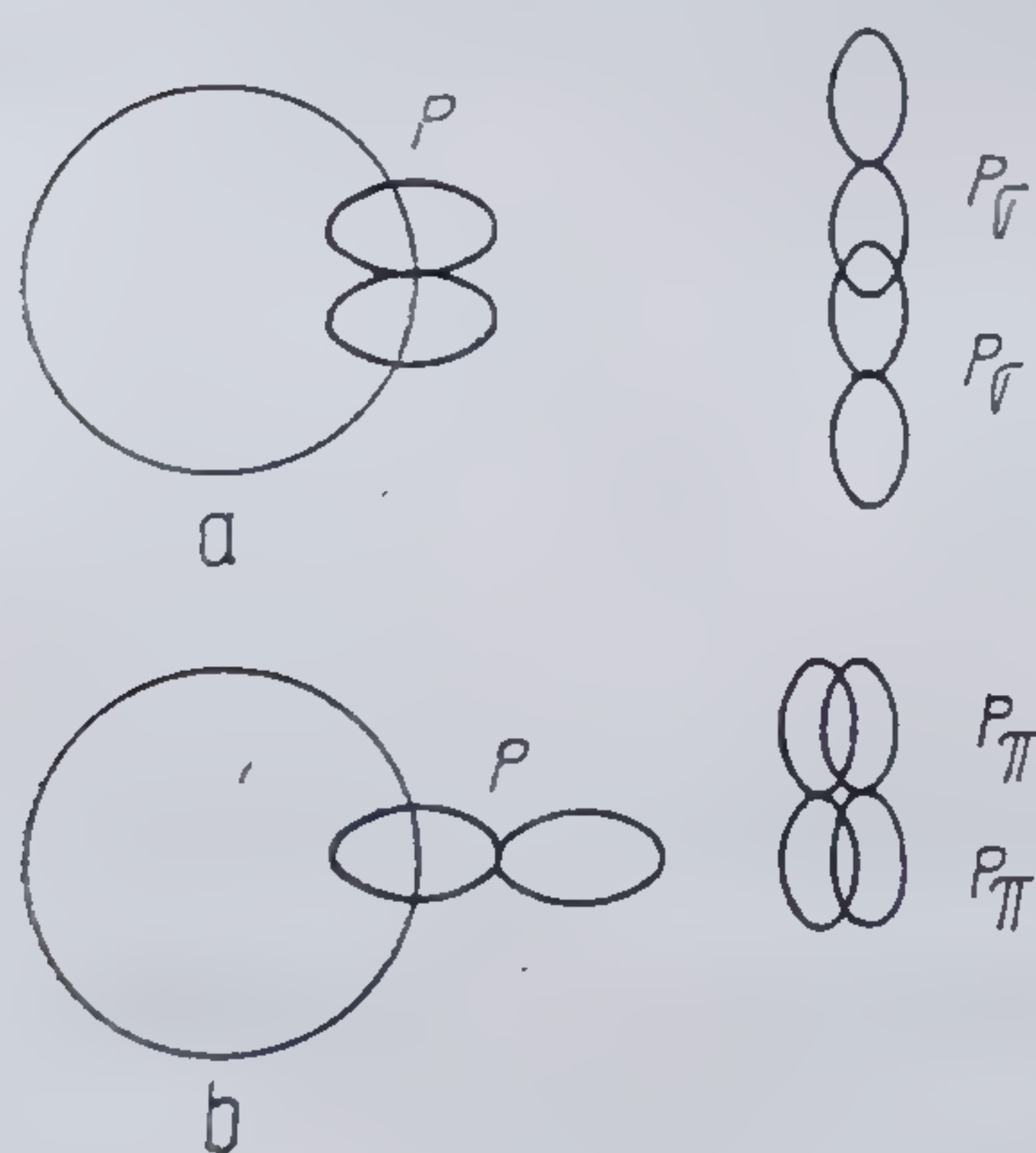


Fig. 10.7.4

Interacțiunile moleculare sînt însă, așa cum arată experiența, interacțiuni slabe, de tip Van der Waals, cu rază scurtă de acțiune și caracter de saturație. Ele apar între molecule neutre și se datoresc momentelor dipolare induse de mișcarea electronilor moleculari, fiind de fapt efecte slabe ale interacțiilor electromagnetice. Tratînd o astfel de problemă în cadrul teoriei perturbațiilor, trebuie remarcat faptul că chiar și în cazul cînd valorile medii ale respectivelor momente dipolare electrice sînt nule ($\langle p_1 \rangle = \langle p_2 \rangle = 0$), se va obține din :

$$E_1 = \int \psi_m^* \left\{ \frac{\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2}{4\pi\epsilon_0 r^3} - 3 \frac{(\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{r}_1)(\mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{r}_2)}{4\pi\epsilon_0 r^5} \right\} \psi_m d\mathcal{V} \quad (10.7.43)$$

în aproximația de ordinul doi, o expresie pentru energia potențială U_m , de forma

$$U_m = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 r^6} \sum \frac{[\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2 - 3(\mathbf{p}_1 \cdot \vec{\mathbf{e}}_1)(\mathbf{p}_2 \cdot \vec{\mathbf{e}}_2)]_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \frac{A}{r^6}. \quad (10.7.44)$$

Înseamnă că forțele moleculare

$$|\mathbf{F}| = - |\nabla U_m| = \frac{c}{r^7} \quad (10.7.45)$$

sînt forțe cu rază scurtă de acțiune.

§ 10.8. SPECTRE MOLECULARE

În general, spectrele moleculare sînt mai complexe decît cele atomice, din cauză că la moleculă intervin, pe lîngă stări electronice excitate, și stări excitate de vibrație și de rotație. Neglijînd interacțiunile dintre aceste mișcări, se poate scrie

$$E = E_e + E_v + E_r \quad (10.8.1)$$

termenii din această sumă descrescînd (în valoare absolută) în ordinea $E_e \gg E_v \gg E_r$. De aceea, la moleculă, peste spectrul electronic se vor suprapune spectrele de vibrație și de rotație, frecvențele liniilor spectrale din aceste spectre fiind date de relația

$$\nu = \frac{1}{h} [(E_e'' - E_e') + (E_v'' - E_v') + (E_r'' - E_r')] = \nu_e + \nu_v + \nu_r. \quad (10.8.2)$$

a) *Spectrele de vibrație-rotatie*. Din cauză că $E_r < E_v$, fiecărei stări de vibrație îi vor corespunde mai multe stări de rotație, iar spectrele

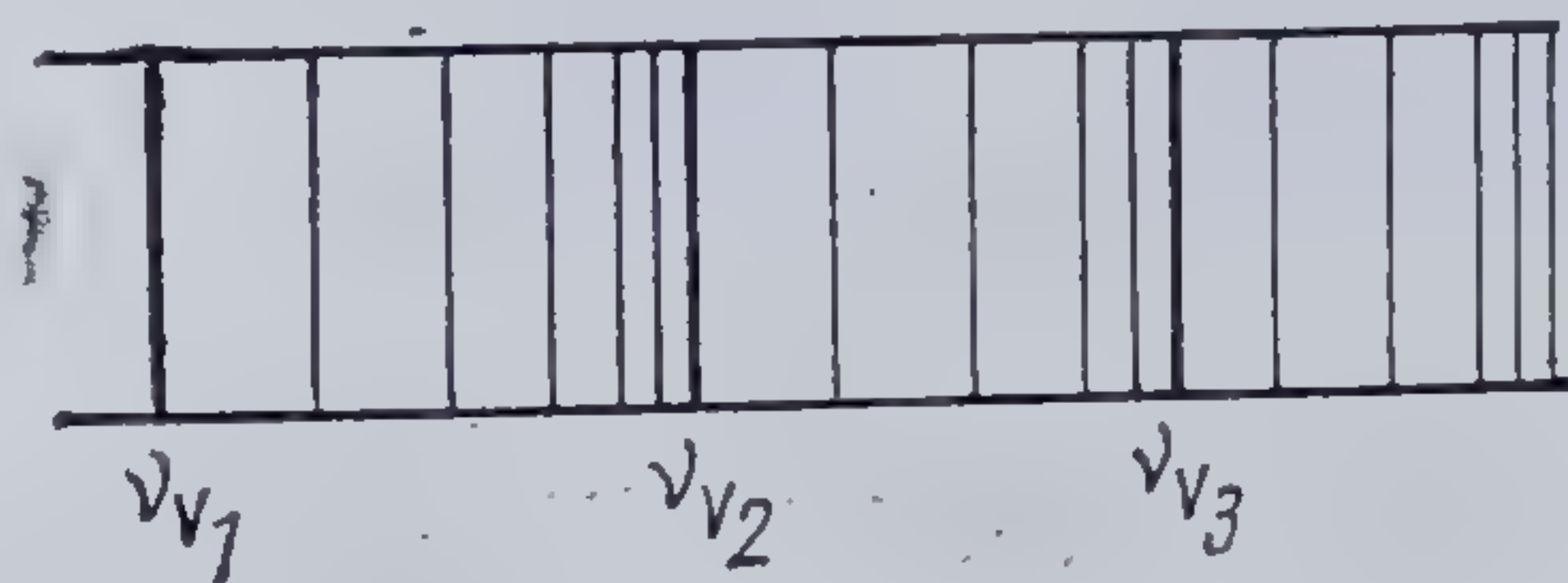


Fig. 10.8.1.

de vibrație-rotatie se vor descompune în benzi de vibrație-rotatie, așa cum se arată în fig. 10.8.1. Intensitatea liniilor spectrale scade, în cadrul unei benzi spectrale, o dată cu creșterea frecvenței.

Pentru molecule liniare, care posedă un centru de simetrie (centru de inversie), dacă se iau în considerație și vibrațiile anarmonice, expresia

energiei nivelelor de vibrație va fi dată de o expresie de forma (8.8.94), la care se adaugă și un termen de anarmonicitate pătratic, astfel încît :

$$E_v = h\nu \left(v + \frac{1}{2} \right) - x \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 \quad (10.8.3)$$

De aceea, frecvențele ν_v dintr-un spectru de vibrație sînt date de o relație de forma :

$$\nu_v = A + Bv + Cv^2; v = 0, 1, 2, \dots \quad (10.8.4)$$

A , B și C —fiind constante, care depind numai de tipul moleculei. De exemplu, la molecula CN, așa-numitele numere de undă $\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda}$, sînt date de expresia : $\tilde{\nu}_v = 25797,85 + 3,848 v + 0,0675 v^2 (\text{cm}^{-1})$.

Desigur că vor interveni și aici o serie de reguli de selecție, de tipul celor menționate în §10.4 pentru cazul spectrelor atomice, cum sînt cele privitoare la simetria stărilor între care are loc tranziția sau cele care interzic tranziții între stări cu multiplicități spectrale diferite ($\Delta S = 0$). Funcție de complexitatea moleculei și de temperatură, spectrele de vibrație se rezolvă în spectre cu structură electronică (pentru molecule simple și temperaturi scăzute), în spectre de benzi și în spectre continue.

Peste spectrul de vibrație al unei molecule se suprapune întotdeauna un spectru de rotație. S-a văzut că energia nivelelor de rotație este dată de (8.8.130), adică de expresia

$$E_r = E_J = \frac{\hbar^2}{2I} J(J + 1); J = 0, 1, 2, \dots \quad (10.8.5)$$

J —jucînd aici rol de număr cuantic de rotație moleculară. Sînt permise numai tranzițiile pentru care $\Delta J = 0, \pm 1$ și $\Delta L = 0, \pm 1$, ceea ce înseamnă că vor exista următoarele trei benzi de rotație :

— banda pentru care $\Delta L = 0$; $\Delta J = \pm 1$, deci o bandă cu două ramuri R și P , ale căror frecvențe sînt date de expresiile

$$\begin{aligned} \nu_R &= \nu_0 + AJ + BJ^2; J = 0, 1, 2, \dots \\ \nu_P &= \nu_0 - A'J + B'J^2; J = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (10.8.6)$$

— banda pentru care $\Delta L = \pm 1$ și $\Delta J = 0, \pm 1$ cu ramurile R , P și o ramură suplimentară Q , corespunzătoare regulei de selecție $\Delta J = 0$, formată din liniile

$$\nu_Q = A + BJ(J + 1). \quad (10.8.7)$$

Se observă că în toate cele trei cazuri intervin legi pătratice în J , ceea ce înseamnă că liniile spectrale dintr-o bandă de rotație nu sînt egal distanțate între ele, așa cum se vede pe figura 10.8.2. Aceste benzi au o limită netă spre frecvențe mari.

Spectrele de vibrație și de rotație apar pentru majoritatea moleculelor în domeniul infraroșu al spectrului. Ele se pot pune în evidență cu ajutorul instrumentelor spectrale (a spectroscopelor), fie sub formă de spectre de emisie, fie de spectre de absorbție. Studiul acestor spectre prezintă un interes practic deosebit, deoarece oferă informații prețioase

cu privire la structura moleculelor. Aşa, de exemplu, pentru molecule asimetrice, din cauză că în relațiile de forma (10.8.5) vor intra momente de inerție I diferite, funcție de axa în jurul căreia se realizează rotația, se vor obține frecvențe diferite. De asemenea, întrucât un sistem format din N atomi posedă $3N - 6$ grade de libertate (3 grade de libertate aparțin translației, iar trei rotației), vor exista tot atâtea tipuri de vibrații, fiecare

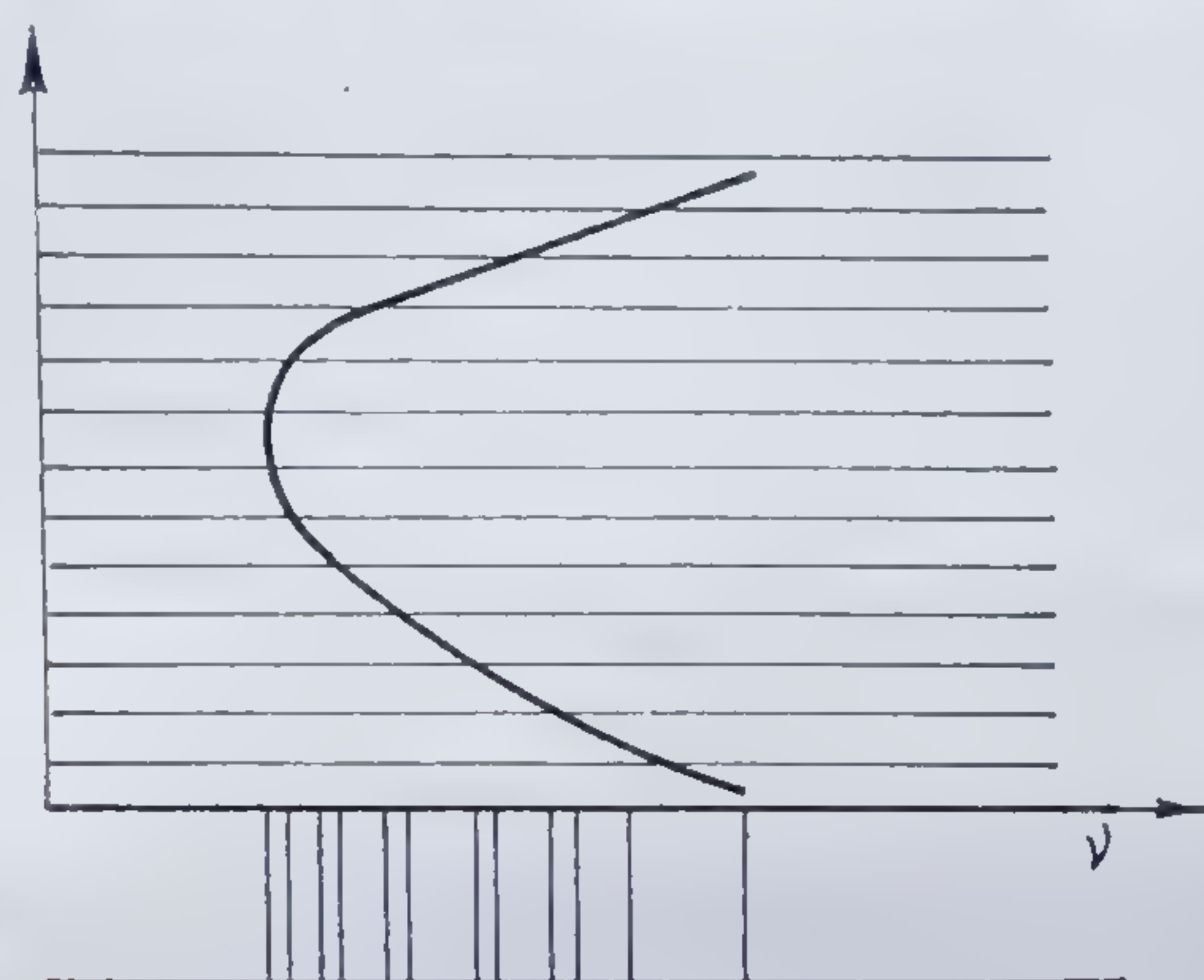


Fig. 10.8.2

depinzând de simetria și de natura legăturilor chimice din cadrul moleculei respective. Există, din acest punct de vedere, *frecvențe de vibrație caracteristice*, cunoașterea lor fiind de mare însemnătate în descifrarea structurilor moleculare. Cîteva exemple de acest fel sînt prezentate în tabelul 10.8.1.

Tabelul 10.8.1

Grupul	$\tilde{\nu}$ cm^{-1}	λ μm	Grupul	$\tilde{\nu}$ cm^{-1}	λ μm	Grupul	$\tilde{\nu}$ cm^{-1}	λ μm
C—C	1000	10	H—Si	2260	2,59	C—O—C	565	17,70
C—N	1100	9	H—Br	2559	3,91	C=CH ₂	985	10,75
C—O	1150	8,5	C=C	1640	6,10	C=CH ₂	1410	10,1
C—F	1200	8,3	C=N	1640	6,10	—CF ₃	1380	7,25
C—S	650	15,4	C=S	1530	6,54	—NO ₂	1565	6,33
C—Cl	750	15,3	C≡N	2250	4,45	C=N	2150	4,65
H—O	3600	2,95	C≡O	2165	4,62	N—Se	2559	3,46

Spectre Raman. Aceste spectre apar, așa cum s-a menționat în §7.6, în lumină difuzată de către un mediu molecular. Radiația difuzată conține pe lângă componentele spectrale ale radiației incidente și componente de vibrație și de rotație ale moleculelor, numite *componente Raman*. Deși aceste componente au intensități slabe, ele pot fi înregistrate și oferă informații directe asupra spectrelor de rotație și de vibrație ale moleculelor [29].

Elemente de fizica stării solide

§ 11.1. NOȚIUNI INTRODUCTIVE

Aplicarea metodelor mecanicii cuantice la studiul sistemelor de microparticule structuralizate geometric regulat în cadrul unei rețele cristaline a condus la rezultate spectaculoase, dînd naștere unui nou domeniu de investigație al fizicii, cunoscut sub denumirea de *fizica stării solide*. Acest domeniu s-a dezvoltat vertiginos, începînd cu deceniul al 4-lea al secolului nostru, producînd un impact deosebit asupra dezvoltării tehnicii [17, 25, 57, 58, 73, 91, 137].

Se știe că aranjarea spațială a microparticulelor ce intră în constituirea unei substanțe este determinată de o serie de factori interni și externi, cum sînt forțele de interacțiune dintre microparticule, temperatura, cîmpul de radiații etc. Toți acești parametri determină, în ultimă instanță, starea energetică a microparticulelor din respectiva substanță.

Energia tuturor microparticulelor dintr-un astfel de sistem (energia cinetică și energia potențială de interacție dintre ele sau cu un cîmp exterior), din care se scade energia de mișcare a sistemului ca un întreg reprezintă, așa cum s-a arătat în §4.2, *energia internă U a sistemului*.

Experiența ne arată că la energii interne mari, microparticulele unei substanțe își pierd neutralitatea electrică, descompunîndu-se în ioni pozitivi și electroni. Se realizează astfel o stare a substanței cu proprietăți specifice, denumită *plasmă* (vezi §. 6.11). La valori mai scăzute ale energiei interne se realizează stările *gazoasă*, *lichidă* și *solidă*, ultimele două numindu-se și *stări condensate*. Toate aceste stări sînt denumite *stări de agregare ale substanței*.

De remarcat că o dată cu scăderea energiei interne a sistemului crește și gradul de ordonare al mișcărilor și al aranjării spațiale (de echilibru) a microparticulelor ce îl compun. Începînd cu starea lichidă, forțele de atracție dintre microparticule (forțele de coeziune moleculară) egalează forțele de repulsie și aceasta determină nu numai un volum propriu pentru stările condensate, ci și o anumită structuralizare a aranjării spațiale a

microparticulelor. Experiențele de difracție ale radiațiilor X au relevat o astfel de structuralizare și la starea lichidă, ea constând în mișcări de vibrație ale moleculelor în jurul unor poziții de echilibru care se modifică treptat în timp. Apare o așa-zisă *ordine apropiată* sau o *ordonare cu rază scurtă de acțiune* (o simetrie internă locală) în jurul unor centre (nefixe) de vibrație.

Starea solidă cristalină se caracterizează printr-o structură spațială stabilă și ordonată, în care intervine *ordinea la distanță* sau *ordonarea cu rază lungă de acțiune* (o simetrie internă extinsă) în sensul că în condiții externe adecvate, constante, ordonarea microparticulelor se păstrează nelimitat în timp și pe domenii macroscopice — la nivelul întregului corp în cazul monocristalelor și la nivelul cristalitelor, în cazul corpurilor policristaline. De aceea, corpurile solide posedă forme și volume proprii. Forma monocristalelor (respectiv a cristalitelor) este *poliedrică* regulată, datorită proprietății acestora de a *cliva*, adică de a se despărți în bucăți pe anumite plane bine definite, numite *plane de clivare*. Existența acestor plane evidențiază faptul că înșiși constituenții microscopici ai stării solide se găsesc într-o structură ordonată.

Există însă și substanțe care prezintă stări intermediare între cea solidă și cea lichidă. În *stările amorfe* și *sticloase* de exemplu, deși corpurile posedă formă și volum propriu, lipsește ordonarea internă cu rază lungă de acțiune. Studiile din ultimii ani au condus la concluzia că aceste substanțe constituie o clasă importantă de solide (solide cu structură dezordonată), cu largi utilizări practice. În același timp, la *stările mezomorfe*, proprii așa-numitelor *cristale lichide*, care de asemenea în ultima vreme și-au găsit multiple aplicații practice [84], încep să apară ordonări mai mult sau mai

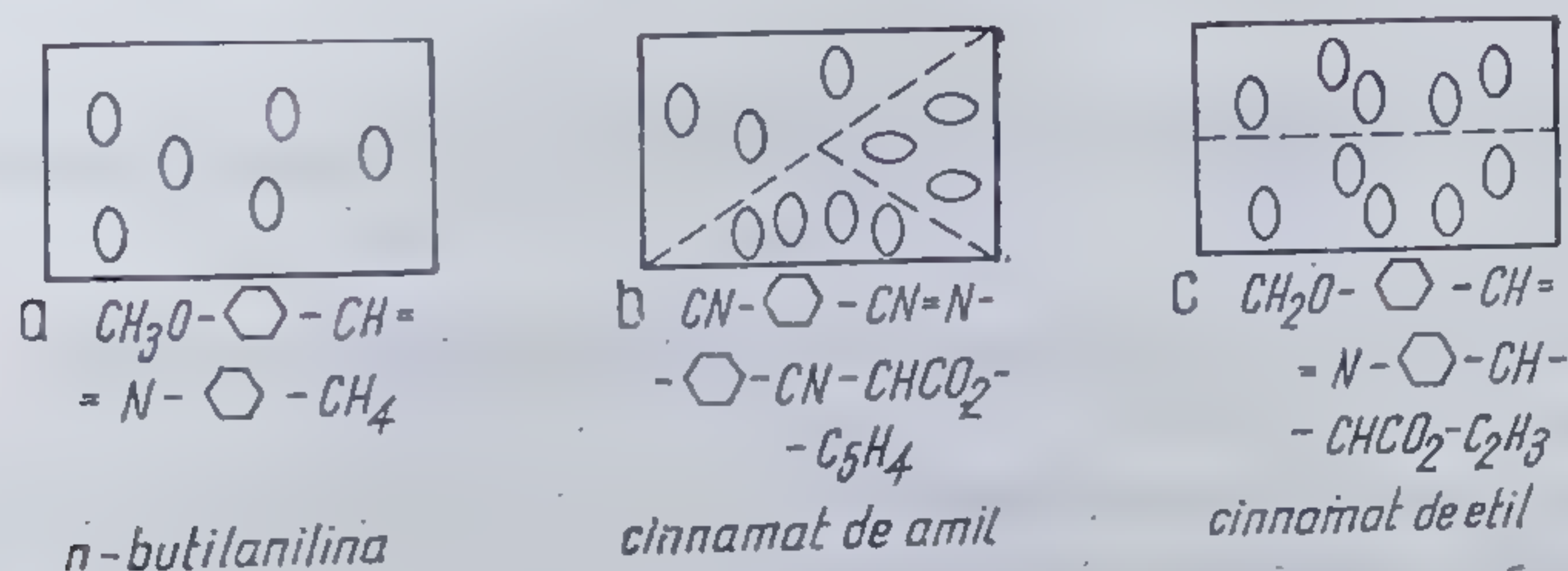


Fig. 11.1.1

puțin regulate. Se cunosc trei clase de cristale lichide, toate formate din agregate moleculare liniare (fig. 11.1.1.) și anume :

a) *starea nematică*, în care agregatele moleculare se orientează pe o anumită direcție, fără a exista însă și o periodicitate în această ordonare, așa cum se întâmplă la *n-butilanilina* (fig. 11.1.1., a) ;

b) *starea colesterică*, în care agregatele se orientează paralel între ele, formînd anumite „domenii”, fără a exista însă vreo periodicitate, situație întîlnită la *cinnamatul de amil* (fig. 11.1.1, b) ;

c) *starea smectică*, în care agregatele moleculare se orientează paralel între ele, cu repetarea periodică a acestor orientări (cazul *cinnamatului de etil* (fig. 11.1.1, c).

Desigur, toate stările de agregare sînt stări de echilibru termodinamic pentru respectiva substanță, dacă parametrii externi sînt menținuți constanți în timp. Întrucît starea solidă cristalină este starea cu energia internă cea mai scăzută, se poate spune că ea corespunde, termodinamic, mini-

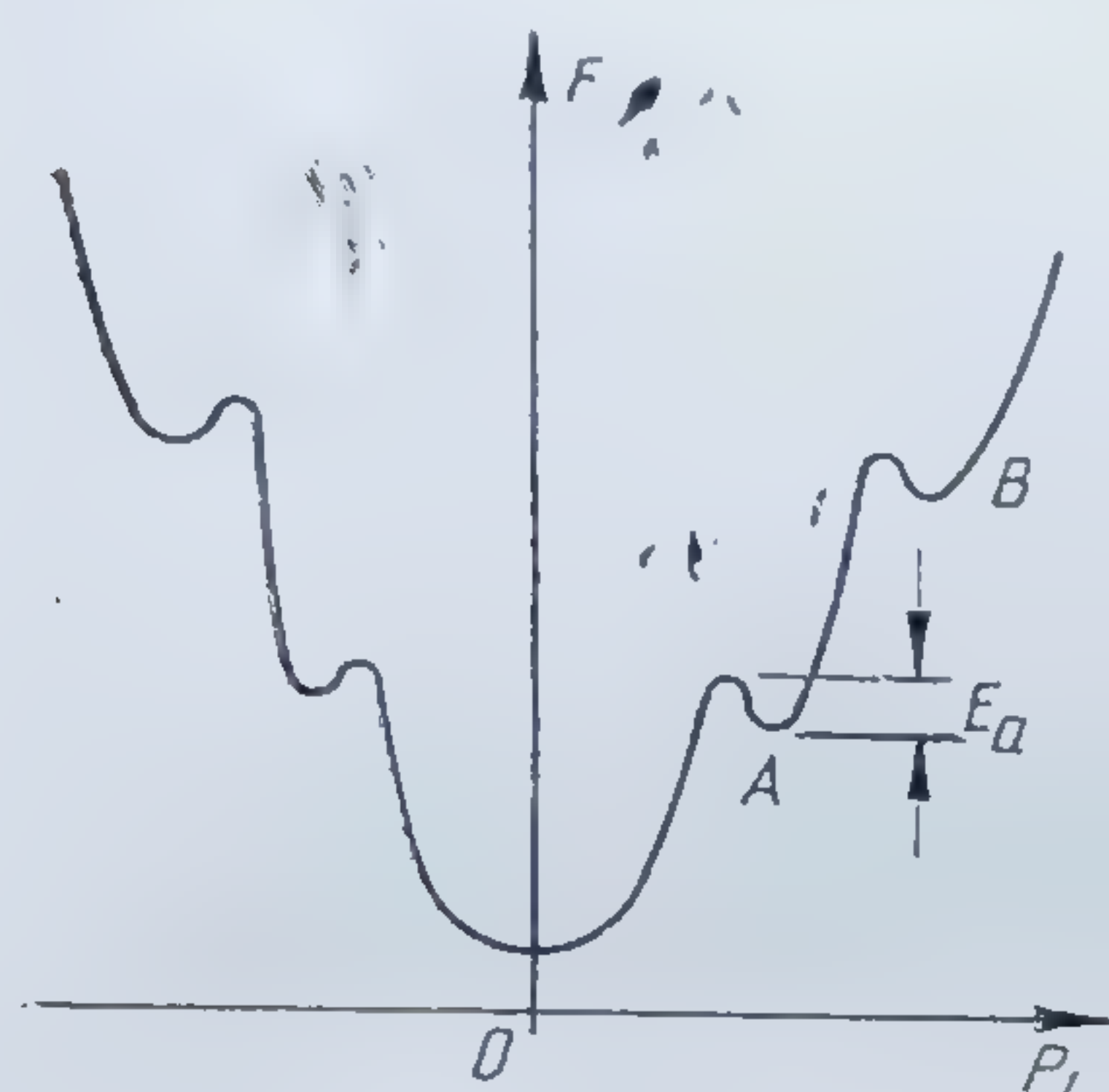


Fig. 11.1.2

mului absolut al energiei libere F a sistemului cuantic, ca funcție de parametrii săi interni (fig. 11.1.2). Minimelor relative A , B le vor corespunde stările amorfă. O astfel de imagine este în concordanță cu experiența, deoarece, prin transferarea unei energii de activare E_a , egală cu „adîncimea” minimelor secundare, starea amorfă trece într-o stare policristalină.

În viziunea actuală, starea solidă este starea de agregare a substanței care posedă următoarele caracteristici principale * :

- se realizează prin germinare, urmată de o creștere lentă;
- clivează și de aceea posedă forme poliedrice regulate;
- posedă o simetrie internă extinsă de așezare a constituentilor, o ordonare cu rază lungă de acțiune (ordine la distanță);
- proprietățile fizice sînt anizotrope, adică depind de direcția în care sînt urmărite față de axele cristaline.

§ 11.2. STAREA CRISTALINĂ ȘI SIMETRIA EI

11.2.1. REȚELE ȘI STRUCTURI CRISTALINE

Simetria internă a solidelor este pusă în evidență prin studii de difracție a razelor X, a electronilor și neutronilor (vezi § 10.2.5); expresia ei macroscopică o constituie o *simetrie externă*, numită adesea *sinonimie*. Simetria externă se evidențiază pregnant la corpurile monocristaline care posedă întotdeauna forme poliedrice regulate, cu fețe (F) plane, muchii (M) drepte și colțuri (C) ascuțite. Este interesant de remarcat că numărul acestor elemente satisface întotdeauna, pentru un monocristal oarecare, relația

$$F + C = M \div 2. \quad (11.2.1)$$

Pentru descrierea matematică, analitică și riguroasă, a simetriei cristalelor s-au pus în evidență *axe* de simetrie, *plane* de simetrie și *centre* de

* Este omisă, așa cum se vede, clasa solidelor cu structură dezordonată (amorfă și sticloase), al căror studiu este în curs de constituire [17].

simetrie ; rotații cu unghiuri φ bine definite și/sau reflexii față de aceste elemente precum și combinații ale acestora, care transformă geometric atât imaginea cristalului, cât și distribuția microscopică a constituenților săi în ele însele. În sens matematic, „simetria“ este o operație care transformă cristalul în el însuși.

Studiul relațiilor dintre fețele unui monocristal, unghiurile diedre formate de aceste fețe, muchiile și alte elemente cristaline i-a condus pe cristalografi la concluzia că există un număr finit de singonii care se pot grupa în 7 sisteme cristalografice, 32 clase și 230 subclase cristalografice.

Faptul că prin clivare forma poliedrică a unui monocristal poate fi redusă la dimensiuni din ce în ce mai mici (fără ca această formă să se modifice) i-a făcut pe unii să creadă că înseși microparticulele constitutive ale stării solide (atomi, ioni, molecule) posedă o astfel de formă geometrică. Combătînd această idee, A. Bravais introduce, în anul 1850, noțiunea de *rețea cristalină*, prin înlocuirea microparticulelor constitutive cu centrele lor punctiforme de masă. În felul acesta, el reușește să demonstreze că numărul finit de singonii cristaline este determinat de extența unui număr finit de moduri de aranjare spațială a acestor centre punctiforme, numite *noduri ale rețelei*, care asigură o simetrie extinsă spațial. În felul acesta se naște *teoria simetriei rețelelor cristaline*. Vom expune succint această teorie, întrucît pe baza ei poate fi realizată nu numai o clasificare a structurilor cristaline, structuri ce se obțin prin atașarea unei *baze a structurii* fiecărui nod al rețelei cristaline, bază formată dintr-un ion, atom, moleculă sau grupuri de astfel de microparticule, ci și o simplificare extrem de utilă în studiul comportării (clasice sau cuantice) a microparticulelor constitutive ale respectivei structuri.

Într-adevăr, așa cum se va arăta în continuare, este suficient să cunoaștem starea fizică a unui număr mic de microparticule, ce populează o așa-zisă *celulă elementară a rețelei*, deoarece proprietățile întregului cristal se obțin apoi prin operații de translație în lungul a trei direcții cristaline, care formează *axele cristaline*. Mai mult chiar, descrierea cuantică a stării microparticulelor din celula elementară trebuie făcută printr-o funcție de undă $\psi(\mathbf{r})$ care să rămână invariantă față de toate operațiile de simetrie care suprapun celula elementară peste ea însăși.

Restricțiile impuse de simetriei asupra diverselor mărimi tensoriale prin care se caracterizează proprietățile anizotrope ale cristalelor (elastice, termice, electrice, magnetice, sau combinații ale acestora), ca și asupra funcțiilor de undă ale obiectelor cuantice din alcătuirea cristalului ușurează considerabil determinarea acestora. Tocmai aceste simplificări au făcut posibilă tratarea cuantică a stării solide, conducînd la obținerea, în ultimii 40—50 de ani, a unor progrese nebănuite atât în ceea ce privește utilizarea practică a solidelor, cât și în privința descoperirii unor fenomene fizice cu totul noi, specifice acestei stări de agregare.

Prin *rețea cristalină* se înțelege un sistem de puncte, numite *noduri ale rețelei*, dispuse periodic în lungul a trei direcții spațiale (Ox_c, Oy_c, Oz_c , fig. 11.2.1), în general neregulare între ele, numite *axe cristaline*. Mărimile a_1, a_2, a_3 și α, β, γ sînt denumite *constante ale rețelei*. Primele trei

exprimă valoarea și sensul translațiilor ce lasă invariante nodurile în lungul axelor cristaline și se numesc *vectori de bază ai translației**.

Se observă că elementul de rețea cu volum minim este paralelipipedul, care are noduri numai în colțurile sale. Acesta poartă numele de *celulă primitivă* și se notează prin P . Rețeaua cristalină se poate construi prin translatarea acestei celule în lungul axelor cristaline, cu distanțe egale cu $|a_1|$ în lungul axei Ox_c , $|a_2|$ în lungul lui Oy_c și $|a_3|$ în lungul lui Oz_c . Bravais este primul care a demonstrat că toate tipurile de rețele cristaline pot fi obținute în acest mod, dar cu celule care posedă noduri nu numai în colțuri, ci și la intersecția diagonalelor fețelor sau a diagonalelor volumetrice, numite *celule elementare*. Forma acestor celule și respectiv numărul de celule elementare distincte sînt determinate de numărul și de tipul operațiilor

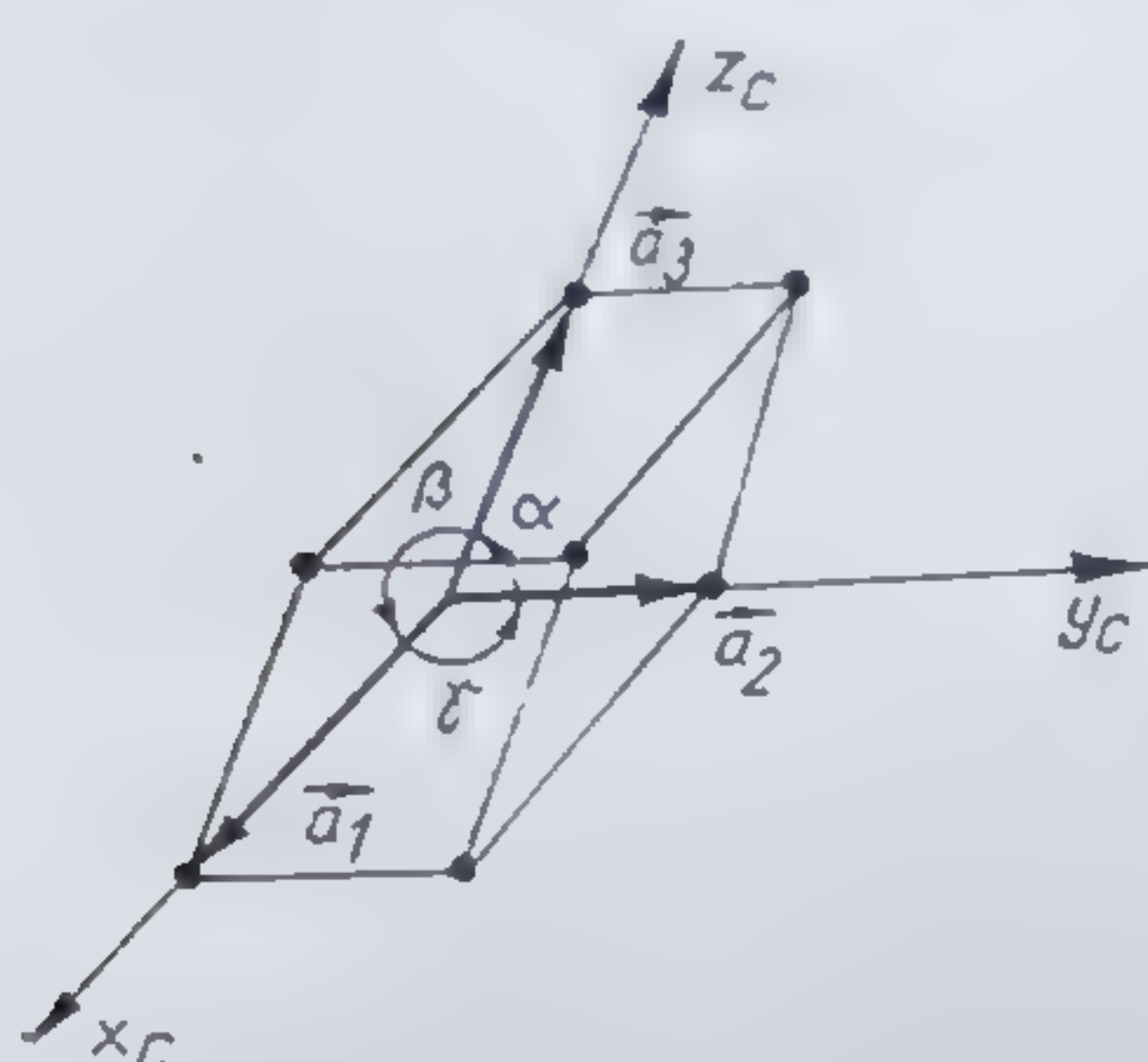


Fig. 11.2.1

de simetrie care suprapun rețeaua peste ea însăși. Desigur că atât numărul, cât și tipul acestor operații de simetrie sînt limitate.

Ca operații de simetrie pot interveni operații simple, cum sînt: *translația*, *rotația*, *reflexia*, *inversia* și operații compuse, ca: *roto-translația*, *roto-reflexia* și *roto-inversia*. Este necesar însă să se precizeze și direcția (axa) de translație, axa de rotație, planul de reflexie, centrul de inversie, acestea purtînd denumirea de *elemente de simetrie*.

a) *Translația*: se poate exprima prin intermediul vectorilor de bază ai translației, în sensul că vectorul de poziție R_n al oricărui nod al rețelei

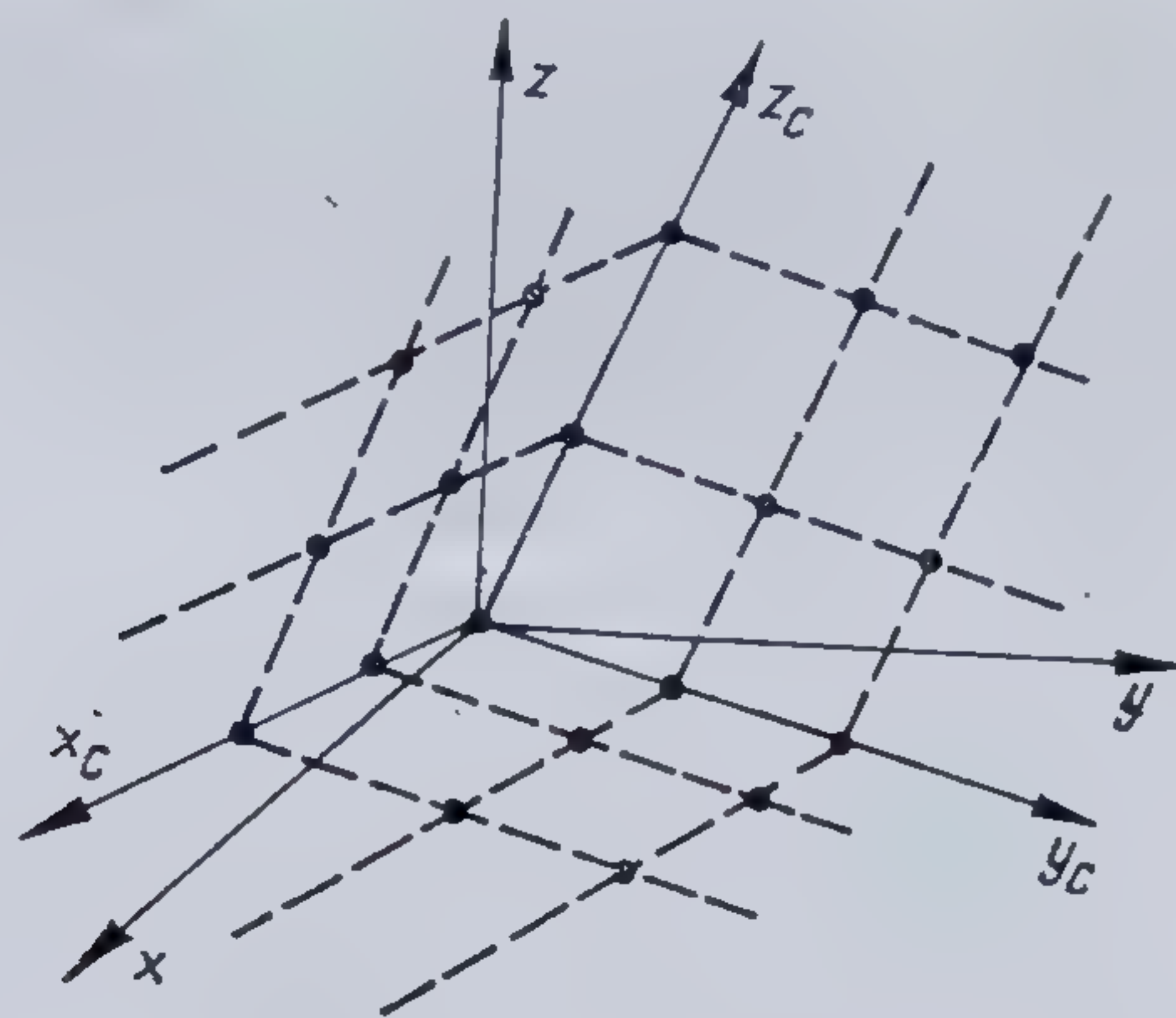


Fig. 11.2.2

(fig. 11,2.2) poate fi exprimat sub forma :

$$R_n = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3 \quad (11.2.1)$$

* Adesea, prin constante ale rețelei sînt desemnate numai mărimile $|a_1| = a_1$; $|a_2| = a_2$ și $|a_3| = a_3$, a_1 , a_2 și a_3 purtînd denumirea de „vectori de bază ai translației”.

în care n_1, n_2, n_3 parcurg independent şirul numerelor întregi $(0, 1, 2, \dots)$. Dacă vectorii de bază ai translaţiei $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ se raportează la un sistem de referinţă cartezian $Oxyz$, cînd $\mathbf{a}_1 = a_{1x}\mathbf{i} + a_{1y}\mathbf{j} + a_{1z}\mathbf{k}$, atunci expresia (11.2.1) se va putea scrie sub următoarea formă concisă :

$$\mathbf{R}_n = \begin{pmatrix} a_{1x} & a_{2x} & a_{3x} \\ a_{1y} & a_{2y} & a_{3y} \\ a_{1z} & a_{2z} & a_{3z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix} = \mathbf{A}|\mathbf{n}\rangle \quad (11.2.2)$$

în care prin \mathbf{A} s-a notat *matricea specifică celulei elementare*, iar prin $|\mathbf{n}\rangle$ — vectorul coloană, definit pe ansamblul numerelor naturale (n_1, n_2, n_3) .

Desigur că matrice \mathbf{A} va depinde de tipul celulei elementare. În figura 11.2.3 sînt reprezentate celulele elementare pentru sistemul cubic

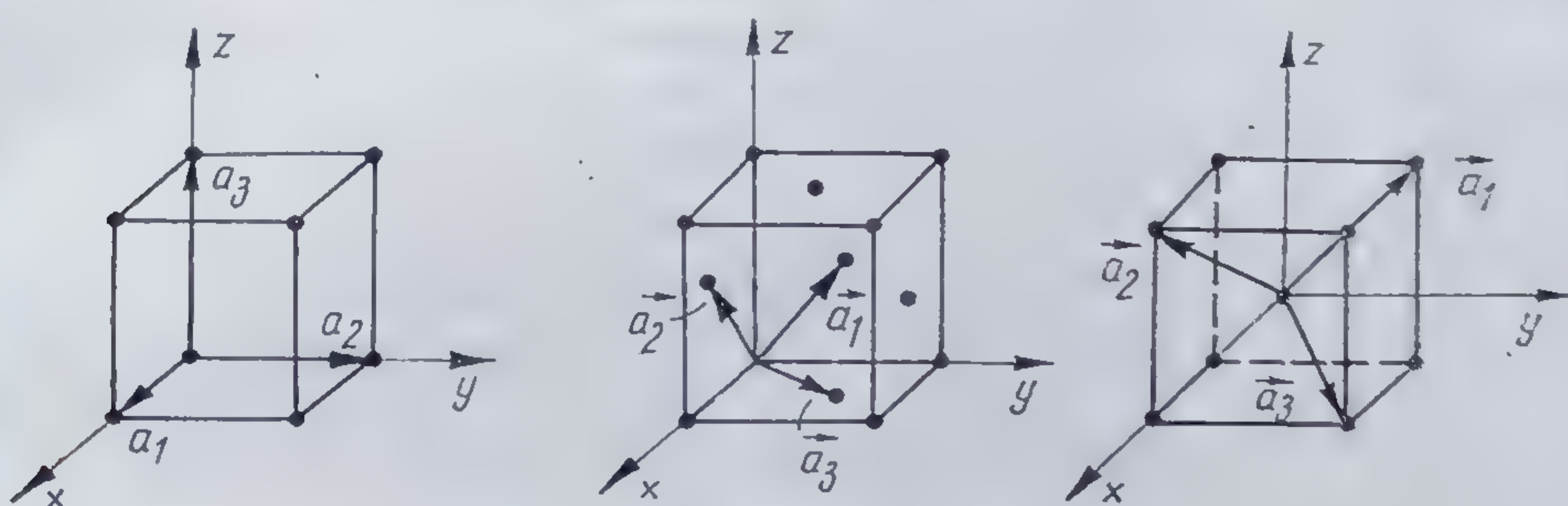


Fig. 11.2.3

(vezi în continuare) şi anume : cubic simplu (CS), cubic cu feţe centrate (CFC) şi cubic cu volum centrat (CVC), pentru care :

$$\mathbf{A}_{CS} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & a \end{pmatrix}; \quad \mathbf{A}_{CFC} = \begin{pmatrix} 0 & a/2 & a/2 \\ a/2 & 0 & a/2 \\ a/2 & a/2 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{A}_{CVC} = \begin{pmatrix} -a/2 & a/2 & a/2 \\ a/2 & -a/2 & a/2 \\ a/2 & a/2 & -a/2 \end{pmatrix} \quad (11.2.3)$$

Se observă că :

$$|\mathbf{a}_1|_{CS} = a; \quad |\mathbf{a}_1|_{CFC} = \frac{\sqrt{2}}{2}a; \quad |\mathbf{a}_1|_{CVC} = \frac{\sqrt{3}}{2}a \quad (11.2.4)$$

Din regula produsului scalar, $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j = a_i a_j \cos \theta_{ij} = \sum_k a_{ik} a_{jk}$, se obțin imediat următoarele valori pentru unghiul dintre vectorii de bază

$$\cos \theta_{cvc} = \frac{-\frac{a^2}{4} - \frac{a^2}{4} + \frac{a^2}{4}}{\sqrt{\frac{3}{4}a^2 + \frac{3}{4}a^2}} = -\frac{\sqrt{3}}{2} \Rightarrow \theta_{cvc} = 109^\circ 30'; \quad \theta_{cfc} = 60^\circ. \quad (11.2.5)$$

b) *Rotația*: este operația de simetrie care suprapune rețeaua peste ea însăși, prin rotirea cu un unghi $\varphi = \frac{2\pi}{n}$ în jurul unei axe, numită *axă de rotație*. O astfel de simetrie se notează prin simbolul „ n ” (în notația internațională) sau prin C_n (în notația Schönflies).

Se poate demonstra că numai rotațiile 1, 2, 3, 4 și 6 sînt operații de simetrie pentru o rețea cristalină. Într-adevăr, dacă se consideră un șir reticular de noduri $A_1, A_2, A_3 \dots$ (fig. 11.2.4), dispuse echidistant în

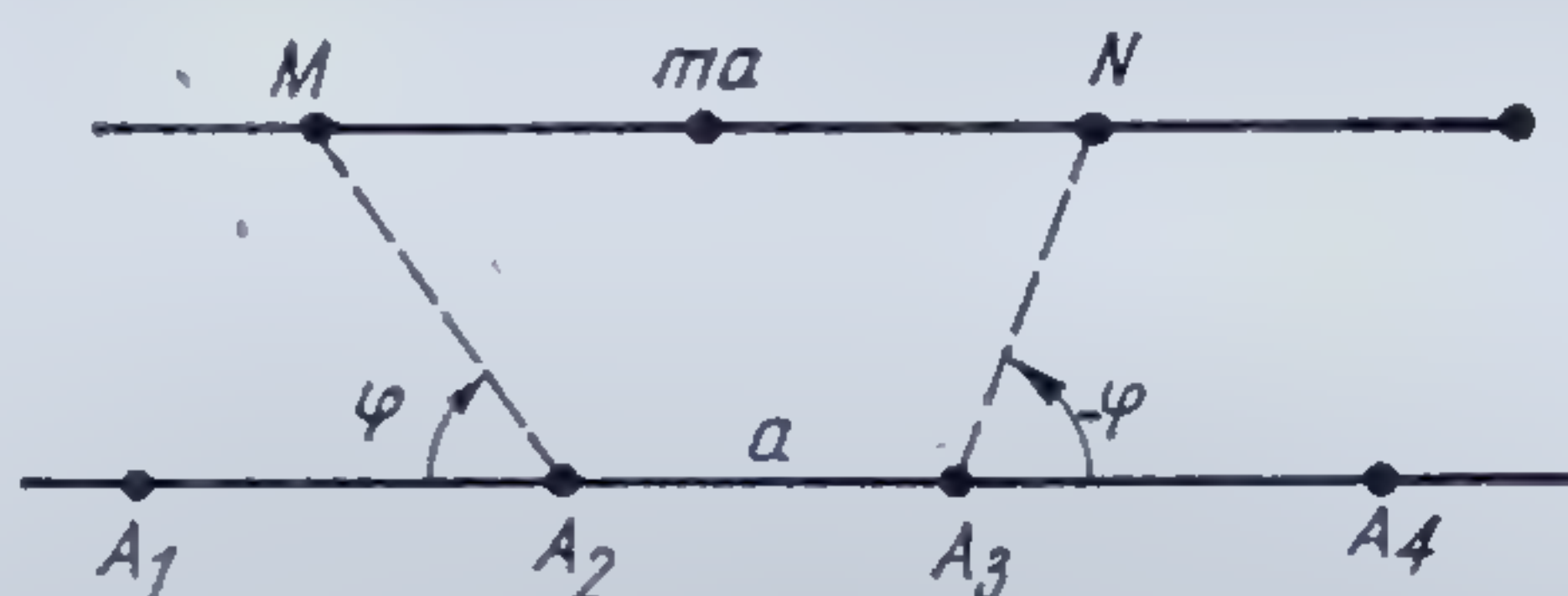


Fig. 11.2.4

lungul unei drepte (ansamblu numit și *rețea unidimensională*) și se urmărește să se stabilească cu ce unghi φ trebuie rotit nodul A_1 , în jurul axei n ce trece prin nodul A_2 și este perpendiculară pe A_1A_2 , pentru a fi suprapus peste un alt nod M al rețelei, atunci va trebui să se admită că și rotația inversă, cu unghiul $-\varphi$, aplicată nodului A_4 , îl va suprapune pe acesta tot peste un nod N al rețelei. Înseamnă că segmentul MN este paralel cu A_2A_3 și, întrucît între M și N trebuie să se găsească un număr întreg m de intervale echidistante, de lungime a , se va putea scrie

$$ma = a + 2a \cos \varphi \quad (11.2.6)$$

din care rezultă

$$\cos \varphi = \frac{m-1}{2} = \frac{p}{2} \quad (11.2.7)$$

p fiind de asemenea un număr întreg. Se observă că există numai următoarele valori

$$p = 0, \pm 1, \pm 2 \quad (11.2.8)$$

care satisfac condiția $0 \leq |\cos \varphi| \leq 1$. Deci vor exista numai cele 5 axe de rotație menționate mai sus (1, 2, 3, 4 și 6 pentru care $p = 2, -2, -1, 0, 1$ și 2; de exemplu, pentru $p = 0$, $\cos \varphi = 0$, $\varphi = \frac{\pi}{2} = \frac{2\pi}{4}$, deci $n = 4$, ș. a. m. d.).

Există o metodă grafică simplă pentru a exprima intuitiv atât rotațiile cât și celelalte operații de simetrie punctuale ale rețelelor cristaline. Aceasta este metoda *proiecției stereografice*, care reduce elementele tridimensionale ale rețelei la elemente bidimensionale. Pentru a obține o proiecție stereografică, se așază monocristalul cu centrul său de masă în centrul unei sfere de rază unitară (fig. 11.2.5) și se duc perpendiculare din acest centru pe fețele cristalului. Aceste perpendiculare vor intersec-

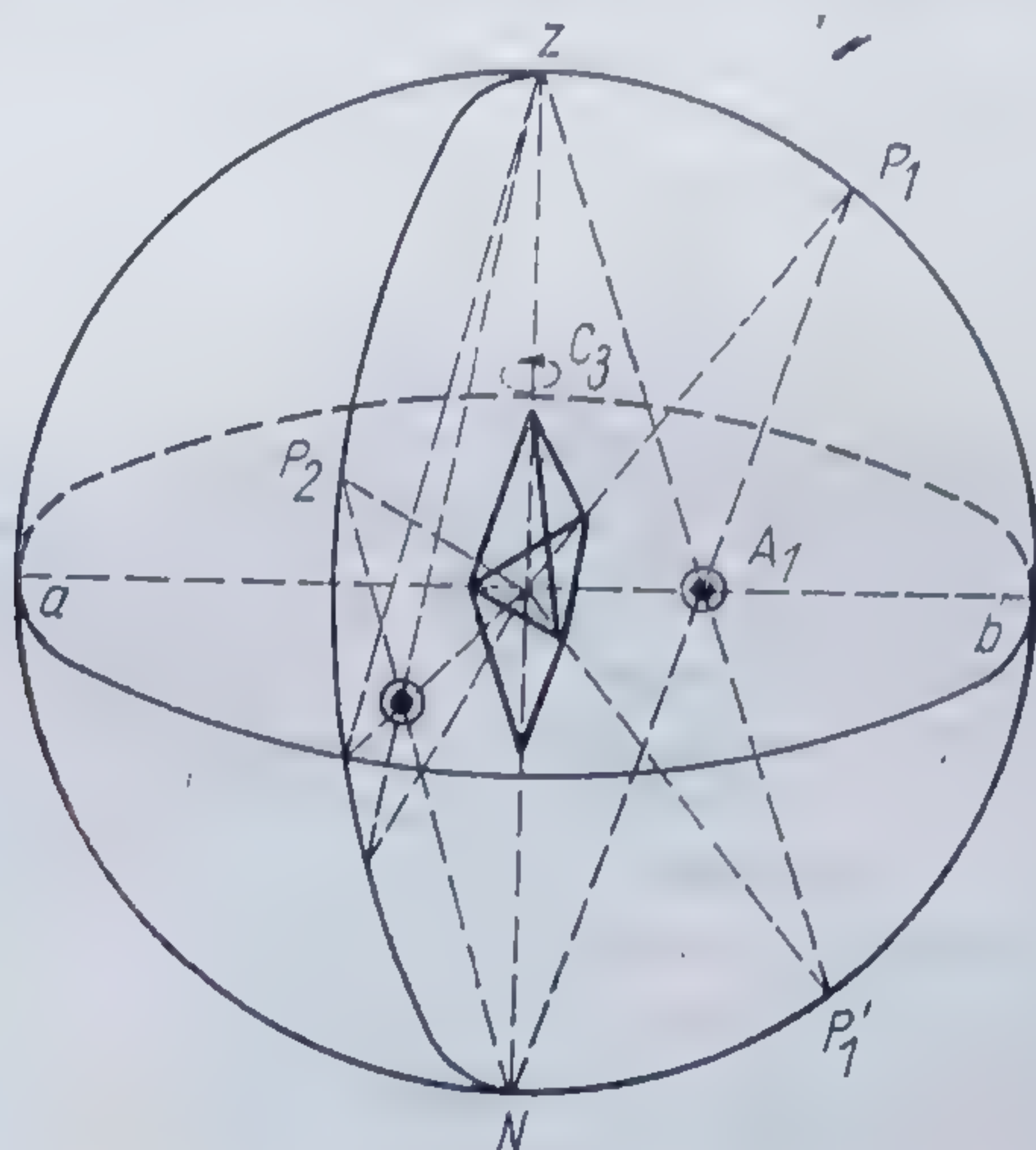


Fig. 11.2.5

ta suprafața sferei în diverse puncte P_i , numite și *poli* ai proiecției. Împărțind sfera într-o emisferă nordică și una sudică prin planul său ecuatorial, perpendicular la axa de rotație de ordin maxim (axa care conține cele mai multe operații de simetrie, cum este axa C_3 din figură), se va obține axa zenit-nadir ZON . Dreptele care unesc nadirul N cu polii P_i de pe suprafața sferei vor intersecta planul ecuatorial în punctele A_i . Aceste puncte reprezintă tocmai proiecția stereografică a cristalului (a celor trei fețe, situate deasupra planului ecuatorial, în cazul de față).

De remarcat că într-o proiecție de acest fel se pot prezenta și axele de simetrie tot prin puncte, iar planele de reflexie prin linii de formă liniară (ab), care corespunde proiecției planului median, normal la axa C_3 . Dar procedând în acest mod, în proiecție vor apare numai punctele corespunzătoare elementelor situate deasupra planului ecuatorial. Pentru a cuprinde și fețele situate sub acest plan se unesc polii P_i , corespunzători acestor fețe, cu zenitul Z , punctele de intersecție ale acestor drepte cu

planul ecuatorial fiind marcat pe figura 11.2.5 cu cerculețe. Procedînd în acest fel, se obțin proiecțiile stereografice ale celor 5 axe de rotație menționate mai sus, în figura 11.2.6* fiind marcate de fapt pozițiile suc-

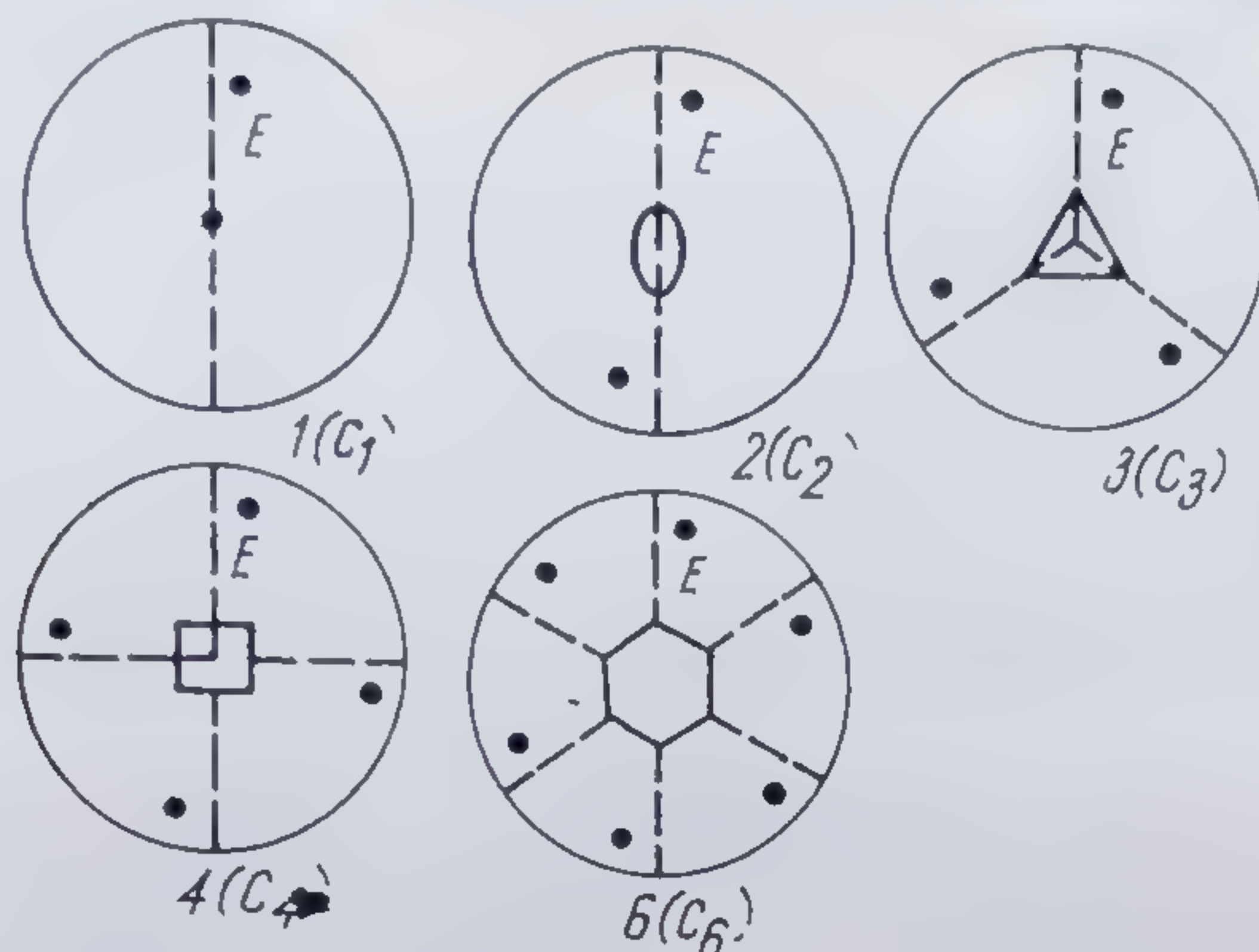


Fig. 11.2.6

cesive pe care le va ocupa un punct corespunzător operației de identitate E , în urma aplicării rotațiilor specifice axelor de rotație respective.

Desigur că și operațiile de rotație pot fi exprimate prin *matrice de rotație* \mathbf{R} corespunzătoare. Acestea vor arăta cum se schimbă coordonatele unui nod al rețelei în urma respectivei rotații. Pentru rotații simple, forma acestor matrice poate fi dedusă, urmărind ce devin axele cristaline în urma unei operații de rotație, dar pentru cazul general va trebui să utilizăm o metodă analitică de stabilire a acestor matrice. Vom exemplifica această metodă pentru o axă de rotație n , a cărei direcție este precizată prin unghiurile θ și ψ (fig. 11.2.7) (împreună cu unghiul de rotație ϕ , aceste unghiuri pot fi privite ca unghiuri Euler), cu ajutorul cărora se

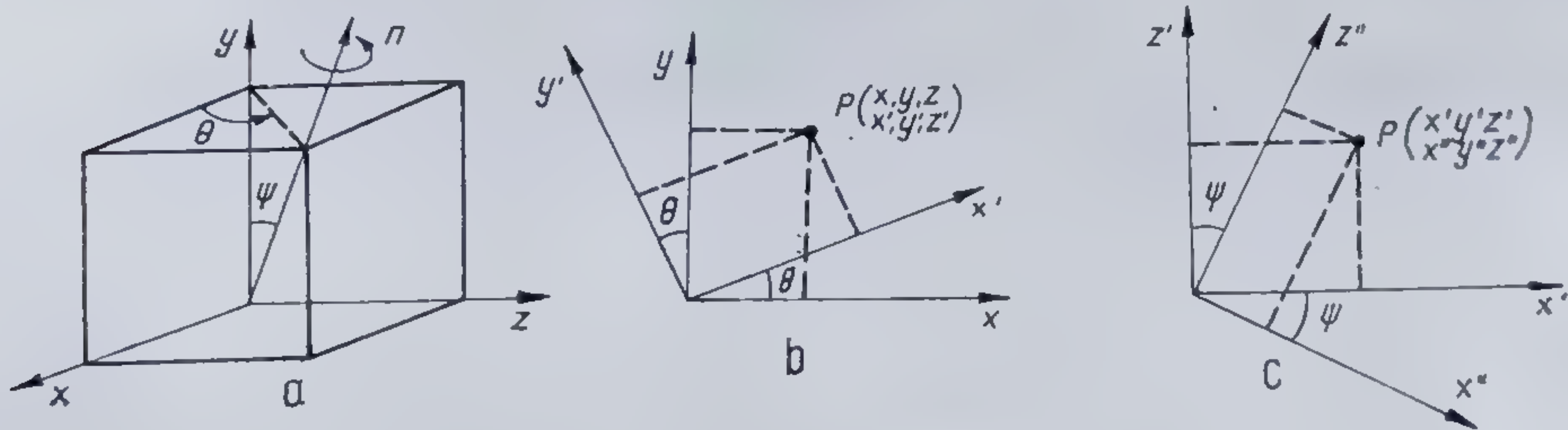


Fig. 11.2.7

pot stabili relațiile de legătură între coordonatele unui sistem cartezian (x''', y''', z''') , legat rigid de rețeaua care se rotește și coordonatele unui sistem cartezian (x, y, z) , fix. Pentru a obține pe \mathbf{R} se va proceda în

* În paranteze sînt trecute notațiile Schöenflies.

felul următor : se va roti mai întâi sistemul de coordonate în jurul axei Oz cu unghiul θ (fig. 11.2.7, b), iar apoi în jurul axei Oy' cu unghiul ψ (fig. 11.2.7, c). În urma acestor două rotații sistemul de coordonate va fi adus cu axa Oz'' în lungul axei de rotație n . Se efectuează rotația cu unghiul

$\varphi = \frac{2\pi}{n}$ în jurul acestei axe, iar pentru a raporta această rotație la ve-

chiul sistem de coordonate, se vor aplica în continuare două operații de rotație în sens invers, cu unghiurile θ și ψ .

Se vede de pe figură că după prima rotație \mathbb{R}_θ avem

$$\begin{aligned} x' &= x \cos \theta + y \sin \theta + z; & y' &= -x \sin \theta + y \cos \theta + z; \\ z' &= 0x + 0y + z \end{aligned} \quad (11.2.9)$$

sau matriceal

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \mathbb{R}_\theta \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (11.2.10)$$

iar după a doua rotație :

$$\begin{aligned} x'' &= x' \cos \psi + y' - z' \sin \psi; & y'' &= 0x' + y' + 0z'; \\ z'' &= x' \sin \psi + y' + z' \cos \psi \end{aligned} \quad (11.2.11)$$

sau matriceal, avînd în vedere și rezultatul (11.2.10),

$$\begin{pmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \psi & 0 & -\sin \psi \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \psi & 0 & \cos \psi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \mathbb{R}_\psi \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \mathbb{R}_{\theta\psi} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (11.2.12)$$

Pentru rotația cu unghiul φ , în jurul direcției Oz'' se va obține matricea

$$\begin{pmatrix} x''' \\ y''' \\ z''' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{pmatrix} \quad (11.2.13)$$

Atunci, matricea rotației cu un unghi φ , în jurul direcției n , raportată la sistemul fix $(Oxyz)$ de coordonate se va putea exprima sub forma

$$\mathbb{R}_{\theta\psi\varphi} = \mathbb{R}_{\theta\psi}^{-1} \mathbb{R}_n \mathbb{R}_{\theta\psi} \quad (11.2.14)$$

unde prin $\mathbb{R}_{\theta\psi}^{-1}$ s-a notat inversa matricei $\mathbb{R}_{\theta\psi}$, iar $\mathbb{R}_{\theta\psi} = \mathbb{R}_\theta \cdot \mathbb{R}_\psi$. De exemplu, pentru cazul simetriei cubice, rotația cu $\varphi = \frac{2\pi}{3}$ în jurul dia-

gonalei volumice 3, pentru care $0 = \frac{\pi}{4}$ și $\cos\psi = \frac{1}{3}$, se va exprima prin matricea :

$$\mathbb{R}_{0\psi\varphi} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ și deci } \begin{pmatrix} x''' \\ y''' \\ z''' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (11.2.15)$$

ceea ce înseamnă că rotația 3 (sau C_3) reprezintă o transformare de forma $x''' \rightarrow y$; $y''' \rightarrow z$; $z''' \rightarrow x$. Desigur că în acest caz o astfel de matrice putea fi dedusă și prin observarea directă a rotației..

O transformare de forma (11.2.14) se numește *transformare de similitudine*. Ea se bucură de proprietatea că nu modifică urma matricei \mathbb{R}_n , adică suma elementelor de pe diagonală acesteia.

Din cele prezentate se desprinde concluzia că prin combinarea a două rotații succesive în jurul aceleiași axe de simetrie se obține o nouă suprapunere a rețelei peste ea însăși. De aceea, se poate spune că totalitatea rotațiilor în jurul unei axe de simetrie formează elementele unui grup de simetrie, definit în sens matematic [42]. Într-adevăr, un astfel de grup va conține elementul unitate E (care exprimă rotația $\mathbb{R}_{2\pi}$), elementul invers \mathbb{R}^{-1} care exprimă o operație de rotire în sens invers rotației \mathbb{R} (evident $\mathbb{R}^{-1}\mathbb{R} = 1$), iar combinațiile a două rotații succesive vor fi tot operații de simetrie ale grupului, bucurându-se de proprietatea de a fi asociative ($\mathbb{R}_A(\mathbb{R}_B\mathbb{R}_C) = (\mathbb{R}_A\mathbb{R}_B)\mathbb{R}_C$).

Se numesc *grupuri punctuale*, grupurile de simetrie care suprapun rețeaua peste ea însăși, păstrându-i un nod fix. Grupul rotațiilor este un astfel de grup punctual de simetrie.

Problema poate fi pusă însă și într-un context mai general și anume ce unghi δ trebuie să formeze între ele două axe de simetrie n_1 și n_2 , astfel încât rotația

$$\mathbb{R}_{n_3} = \mathbb{R}_{n_1}\mathbb{R}_{n_2} \quad (11.2.16)$$

să fie tot o operație de simetrie a rețelei? O astfel de problemă a fost rezolvată de către Euler, care găsește condiția :

$$\cos\delta = \frac{\cos\frac{\varphi_{n1}}{2} \cos\frac{\varphi_{n2}}{2} - \cos\frac{\varphi_{n3}}{2}}{\sin\frac{\varphi_{n1}}{2} \cdot \sin\frac{\varphi_{n2}}{2}} \quad (11.2.17)$$

Într-adevăr, să admitem că, în urma primei rotații, vectorul a_1 este adus peste vectorul a_2 , iar în urma celei de a doua, vectorul a_3 este adus peste vectorul a_1 . Atunci, luând

$$a'_1 = \frac{a_2 \times a_3}{a_1(a_2 \times a_3)}, \quad a'_2 = \frac{a_3 \times a_1}{a_1(a_2 \times a_3)}, \quad a'_3 = \frac{a_1 \times a_2}{a_1(a_2 \times a_3)}$$

se constată că din condiția $\mathbf{a}'_1 \cdot \mathbf{a}'_2 = |\mathbf{a}'_1| \cdot |\mathbf{a}'_2| \cos \delta$ rezultă

$$\cos \delta = \frac{(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)}{|\mathbf{a}_1(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)^2| \cdot |\mathbf{a}'_1| |\mathbf{a}'_2|}.$$

Dar se observă că putem scrie: $(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1) = \mathbf{a}_2 \cdot [\mathbf{a}_3 \times (\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)] = \mathbf{a}_2[\mathbf{a}_3(\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2) - \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_3^2]$ și deci:

$$\cos \delta = \frac{(\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3)(\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_3) - (\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2)(\mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_3)}{a_1 a_2 a_3^2 \sin \frac{\varphi_{n1}}{2} \sin \frac{\varphi_{n2}}{2}} = \frac{\cos \frac{\varphi_{n1}}{2} \cos \frac{\varphi_{n2}}{2} - \cos \frac{\varphi_{n3}}{2}}{\sin \frac{\varphi_{n1}}{2} \sin \frac{\varphi_{n2}}{2}}.$$

De remarcat că din condiția (11.2.17) rezultă că este posibilă o combinație de forma $2 \cdot 2 = 2$, întrucât în acest caz

$$\cos \delta = \frac{\cos \frac{\pi}{2} \cos \frac{\pi}{2} - \cos \frac{\pi}{2}}{\sin \pi/2 \sin \pi/2} = 0; \Rightarrow \delta = \frac{\pi}{2}$$

cele trei axe de ordinul doi trebuind să fie reciproc perpendiculare, dar nu este posibilă o combinație de forma $6 \cdot 4 = 2$, întrucât în acest caz

$$\cos \delta = \frac{\cos \pi/6 \cos \pi/4 - \cos \pi/2}{\sin \frac{\pi}{6} \sin \frac{\pi}{4}} = \sqrt{3} > 1.$$

Prin astfel de încercări se poate arăta că pentru rețelele cristaline există numai următoarele combinații de axe, ca elemente de simetrie: 222; 32(2); 422; 622; 23(3); 432, axele trecute în paranteză fiind echivalente altor operații de simetrie, așa cum se poate vedea pe figura 11.2.8, a, unde sînt schițate aceste grupuri punctuale de simetrie. În figura 11.2.8, b sînt redată, în proiecție stereografică, axele 432 care intervin într-un sistem cubic (există 3 axe de ordinul patru notate prin (\square) , 4 axe de ordinul trei, notate prin (\triangle) și 6 axe de ordinul doi, notate prin (O) , cîteva dintre ele fiind marcate pe figura 11.2.8, c).

c) *rotații improprii (roto-inversia)*: sînt operații de simetrie care constau dintr-o rotație cu unghiul φ în jurul unei axe xx' , urmată de o inversie față de un centru de inversie I_v (fig. 11.2.9), astfel încît nodul P este transpus în poziția P' . Desigur, inversia va fi descrisă prin matricea

$$\mathbb{I}_v = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (11.2.18)$$

Vor exista tot numai 5 roto-inversii, notate prin simbolurile : $\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$ și $\bar{6}$ (respectiv $\bar{n} = \mathbf{R}_n$). În figura 11.2.10 sînt redate în proiecție stereografică, operațiile de simetrie ale acestor grupuri punctuale de simetrie.

Se remarcă faptul că rotoinversia $\bar{2}$ este echivalentă cu o reflexie într-un plan perpendicular la axa de rotație ce trece prin centrul de in-

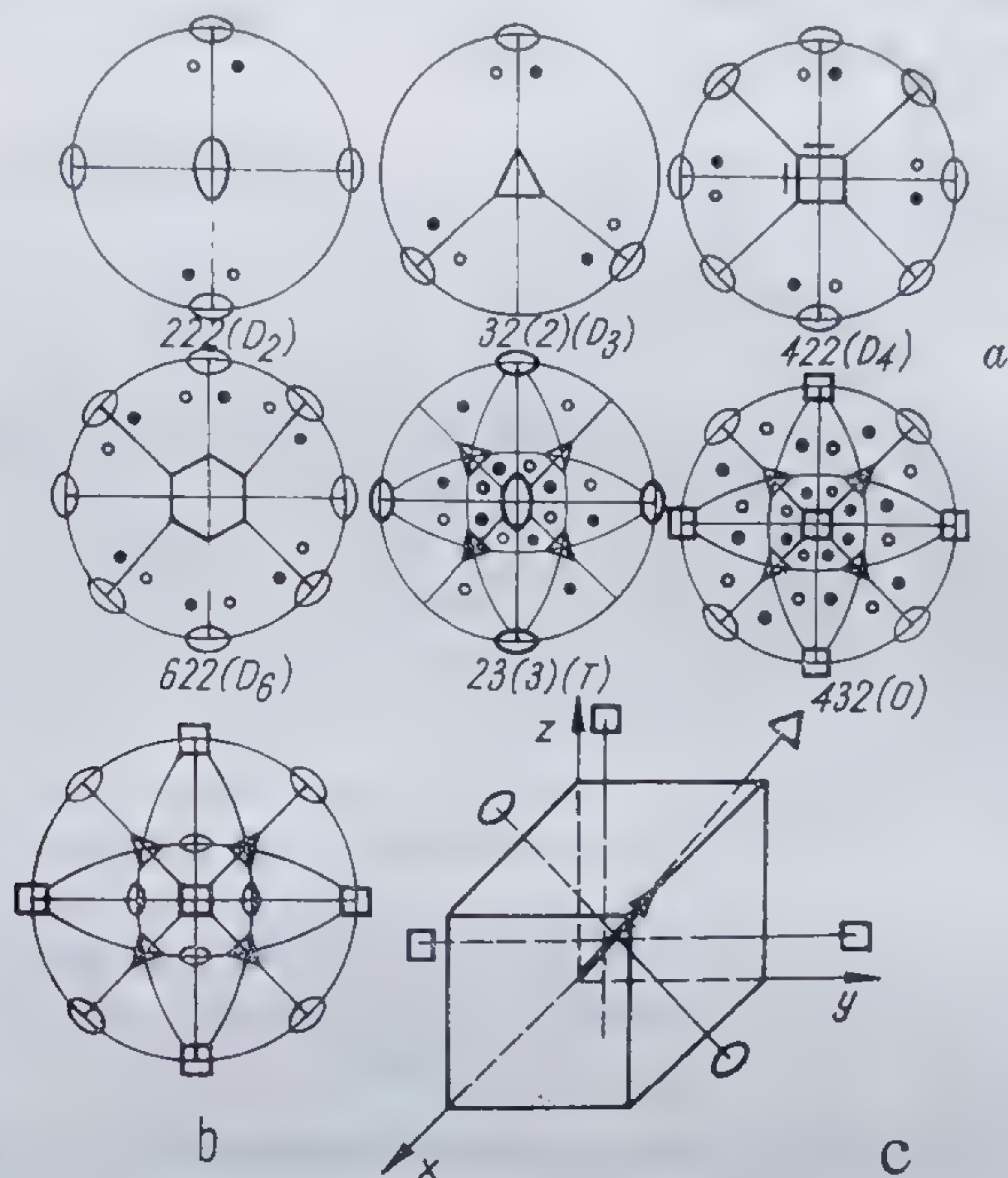


Fig. 11.2.8

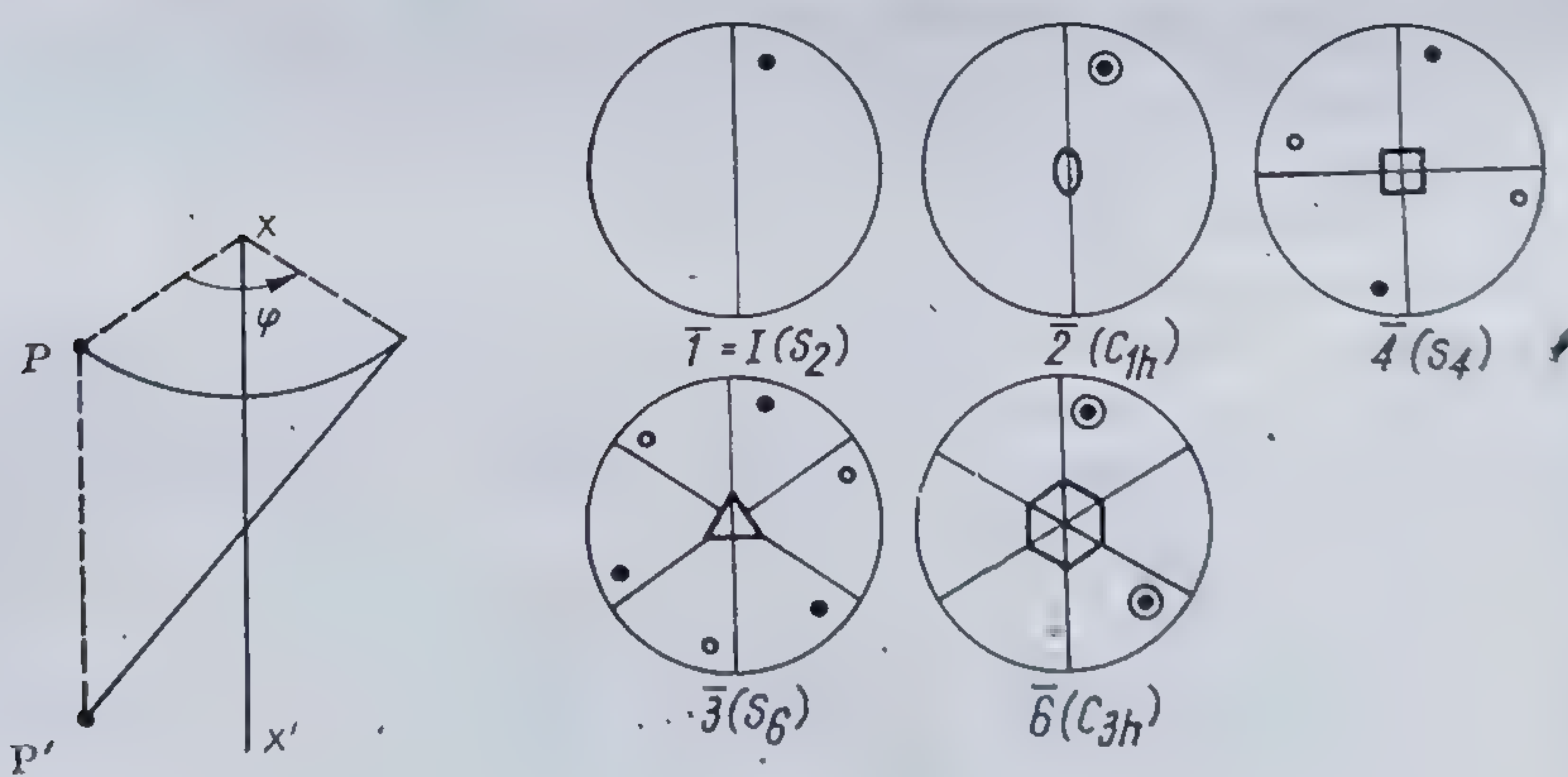


Fig. 11.2.9

Fig. 11.2.10

versie, plan notat simbolic prin $\frac{1}{m}$. El este echivalent și cu o reflexie de tip m , respectiv cu o reflexie într-un plan ce conține axa de rotație (vezi mai departe). În notația Schöenflies, pentru această operație se folosește simbolul C_{σ} . Dacă planul de reflexie m este paralel cu planul xOy , atunci matricea corespunzătoare acestei reflexii va fi de forma

$$\mathbb{M} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (11.2.19)$$

d) *Reflexiile și roto-reflexiile*: reflexiile, notate prin simbolul m , sînt operații simple de oglindire față de un plan de reflexie. Ele formează grupuri punctuale de simetrie, întrucît oglindirea succesivă în două plane P_1 și P_2 , care formează între ele un unghi diedru α (fig. 11.2.11), reprezintă tot o oglindire în planul bisector P_3 al primelor două. Se observă, în același timp, că oglindirea succesivă în planele P_1 și P_2 este echivalentă cu o rotație de unghi 2α , în jurul axei de intersecție a celor două plane de reflexie. De aceea, ca operații de simetrie pentru rețele cristaline vor exista numai următoarele combinații posibile: $2mm$; $3mm = 3m^*$ (al doilea plan de reflexie m este echivalent cu rotație 3 și de aceea se omite în scriere), $4mm$ și $6mm$. Toate aceste operații de reflexie se fac în plane care conțin o axă de rotație, operațiile corespunzătoare fiind reprezentate în fig. 11.2.12.

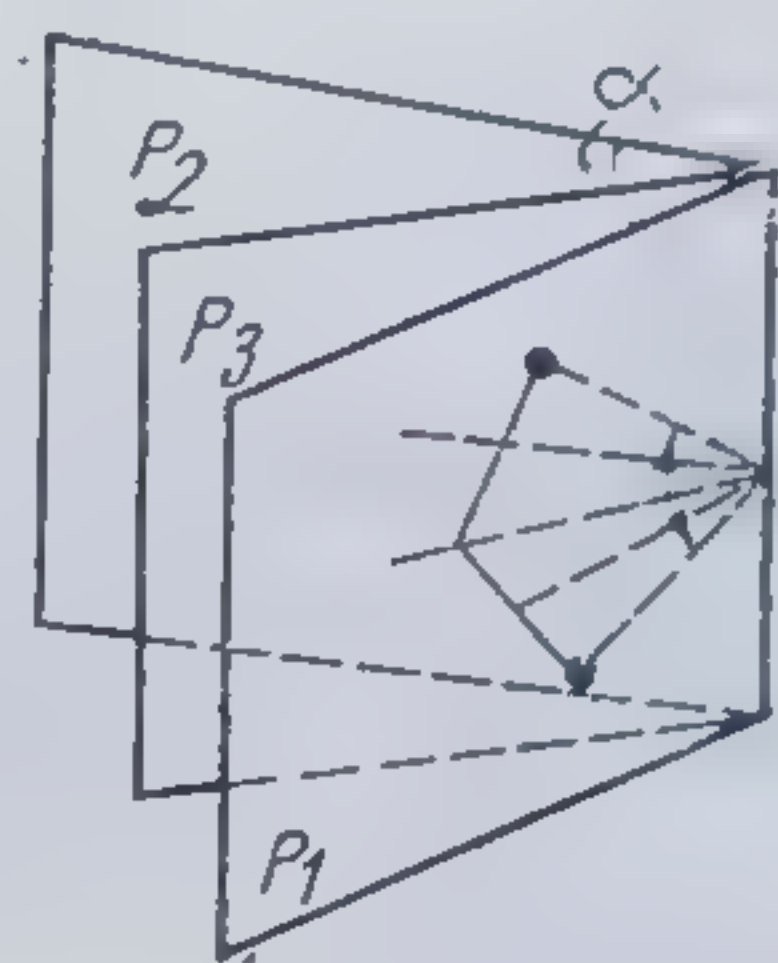


Fig. 11.2.11

Reflexii de simetrie se pot obține și în plane perpendiculare la axele de rotație. acestea fiind notate cu $\frac{n}{m}$. Există următoarele astfel de

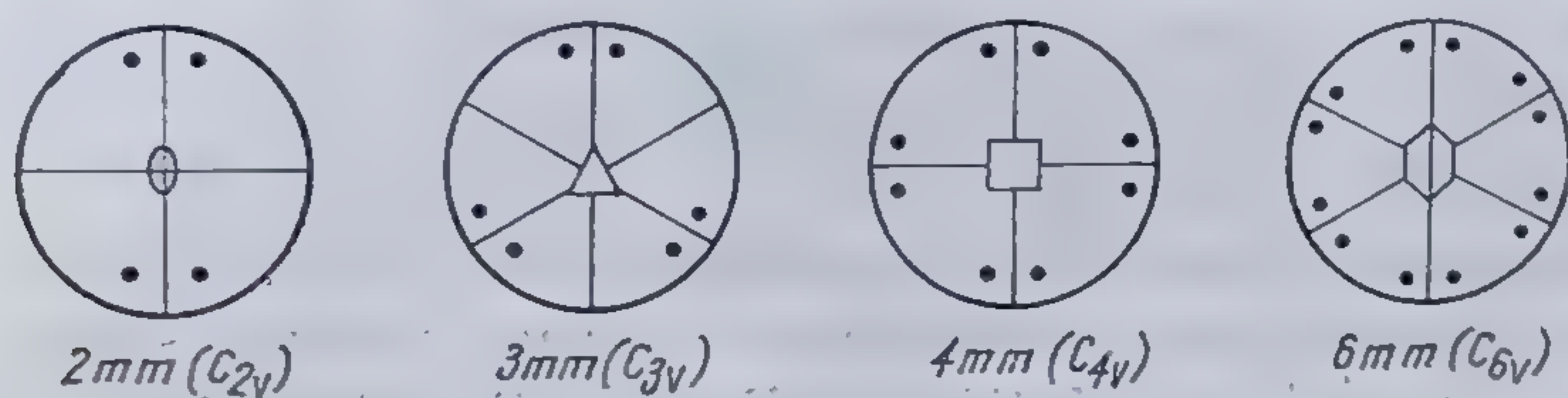


Fig. 11.2.12

operații de simetrie pentru rețele cristaline: $1/m = m = \bar{2}$ (fig. 11.2.10); $2/m$; $3/m = \bar{6}$ (fig. 11.2.10); $4/m$ și $6/m$ (fig. 11.2.13). Sînt posibile de asemenea combinații de forma: $\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$; $\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$; $\frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ (fig. 11.2.13). În sfîrșit, combinînd axele improprii între ele, se obțin grupurile: $\bar{4}2m$; $\bar{4}3m$ (fig. 11.2.14)

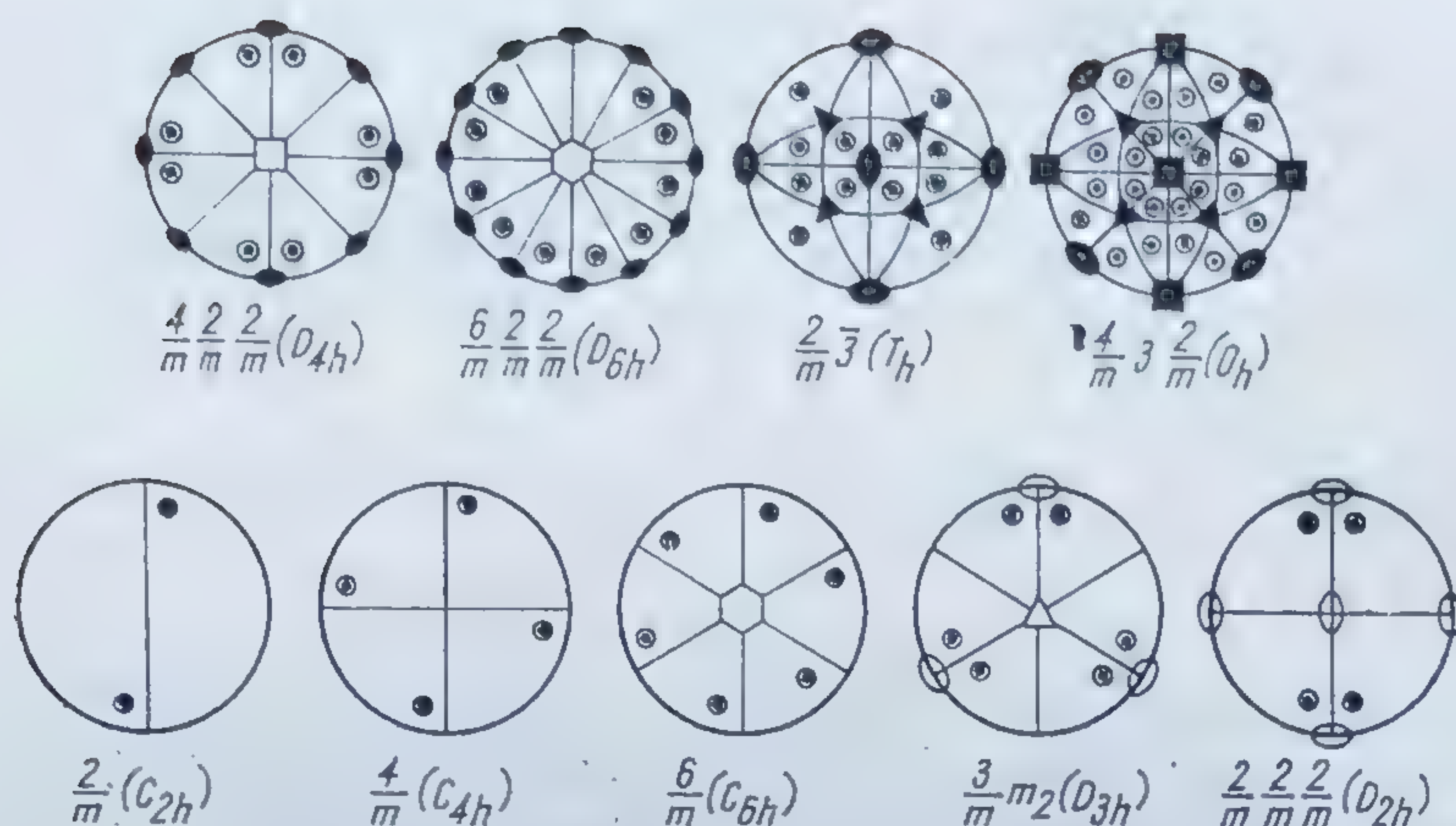


Fig. 11.2.13

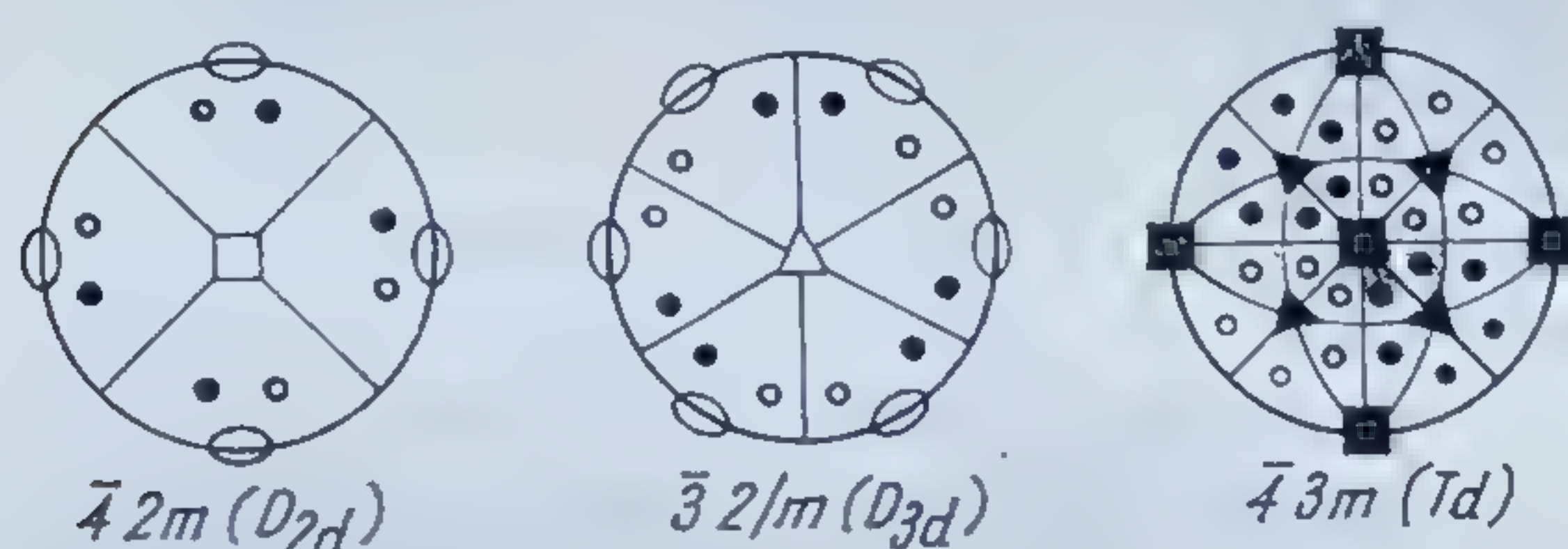


Fig. 11.2.14

11.2.2. REȚELE BRAVAIS

Elementele de simetrie cele mai caracteristice ale unui monocristal sînt axele de rotație de ordin maxim, deoarece ele determină, într-o oarecare măsură, forma celulelor elementare. Într-adevăr, prezența unei axe 6 este compatibilă numai cu o celulă elementară de forma unei prisme hexagonale, iar prezența a trei axe 4, reciproc perpendiculare, este compatibilă numai cu o celulă elementară de formă cubică. De aceea, gruppînd toate simetriile care conțin aceeași axă de simetrie (sau un grup de asemenea axe) se obțin 7 grupuri distincte, care formează cele 7 sisteme *cristalografice*. (vezi tabelul 11.2.1). Se observă că sistemului trigonal, de exemplu, îi este specifică axa 3, care formează grupul de simetrie punctual 3, sistemul mai cuprinzînd și grupurile punctuale $\bar{3}$, 32 , $3m$ și $\bar{3} \frac{2}{m}$.

(Acestea sînt menționate în penultima coloană a tabelului 11.2.1). În anul 1880, V. Gadolin este primul care stabilește că există numai 32 de astfel de grupuri punctuale de simetrie, care formează cele 7 sisteme cristalografice.

S-a menționat mai sus că grupurile punctuale de simetrie conțin toate operațiile de simetrie care suprapun rețeaua peste ea însăși, păstrându-i un nod fix. Bravais arată că o rețea cristalină se poate obține prin translatarea unui element de rețea, de volum minim, care posedă toate operațiile de simetrie ale rețelei, mai puțin translația. Acest element de rețea este tocmai *celula elementară* a rețelei. Se poate spune deci, că grupurile punctuale de simetrie sînt specifice celulelor elementare, în sensul că ele conțin toate operațiile de simetrie care suprapun celula elementară peste ea însăși.

Privită invers, această problemă ne va conduce la concluzia că există un număr limitat de celule elementare, întrucît formele lor trebuie să fie compatibile cu operațiile de simetrie ale grupurilor punctuale de simetrie, iar volumul lor trebuie să fie minim. De exemplu, pentru grupurile 1 și $\bar{1}$ ale sistemului triclinic, se poate construi o singură celulă elementară, care este celula primitivă P , de forma unui paralelipiped cu muchiile și unghiurile dintre aceste muchii neegale între ele, așa cum este prezentată în tabelul 11.2.1. În schimb, în cazul sistemului monoclinic, prezența axei 2 va fi compatibilă numai cu celule ale căror fețe paralele cu această axă sînt de formă dreptunghiulară și deci $\alpha = \beta = \frac{\pi}{2}$. În același timp,

prezența reflexiei m , cere ca triedrul de bază (a_1, a_2, a_3) să rămînă invariant și față de operația de reflexie într-un plan ce conține axa 2, respectiv ca rețeaua plană, perpendiculară la axa 2, să fie invariantă față de reflexia m . Dacă se ia axa 2 paralelă cu vectorul a_3 , atunci cu

$$a_1 = a_{1x}i + a_{1y}j; \quad a_2 = a_{2x}i + a_{2y}j \quad (11.2.20)$$

se vede că reflexia față de planul xOz cere ca și vectorii:

$$a'_1 = a_{1x}i - a_{1y}j; \quad a'_2 = a_{2x}i - a_{2y}j \quad (11.2.21)$$

să fie tot vectori de bază ai rețelei, adică $a'_1 \equiv a_1$ și $a'_2 \equiv -a_2$, lucru posibil numai dacă: $a_{1y} = a_{2x} = 0$ și deci: $a_1 = a_{1x}i$; $a_2 = a_{2y}j$. Trebuie observat însă, că pentru rețele dreptunghiulare mai există încă o posibilitate de a satisface atît rotația 2, cît și reflexia m . Anume, dacă se ia combinația: $a'_1 = a_1$ și $a'_2 = a_1 - a_2$, atunci cu (11.2.20) și (11.2.21), compatibilitatea cu rotația 2 va fi îndeplinită, dacă


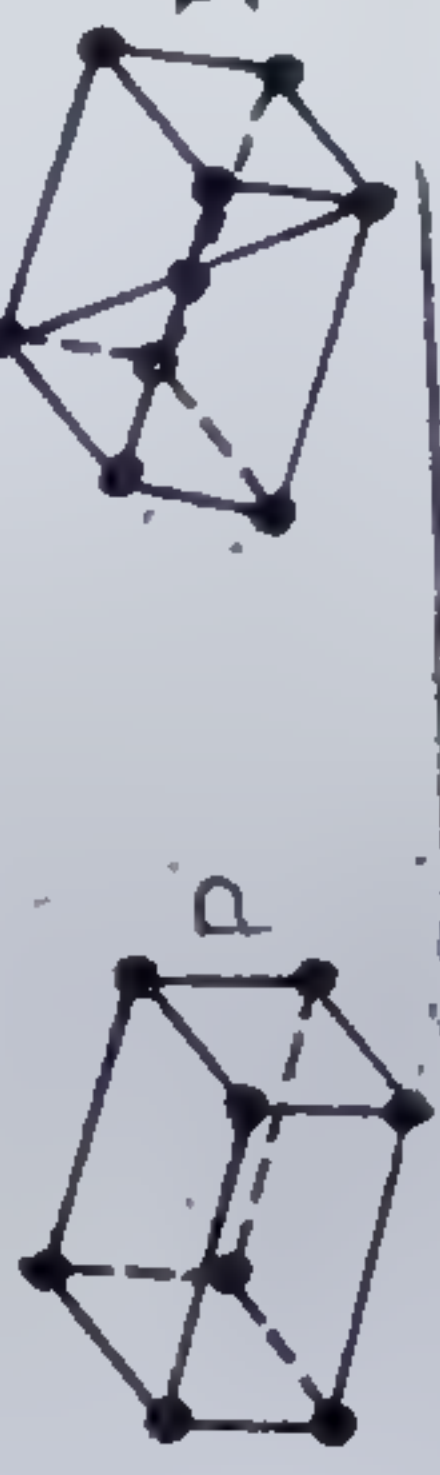
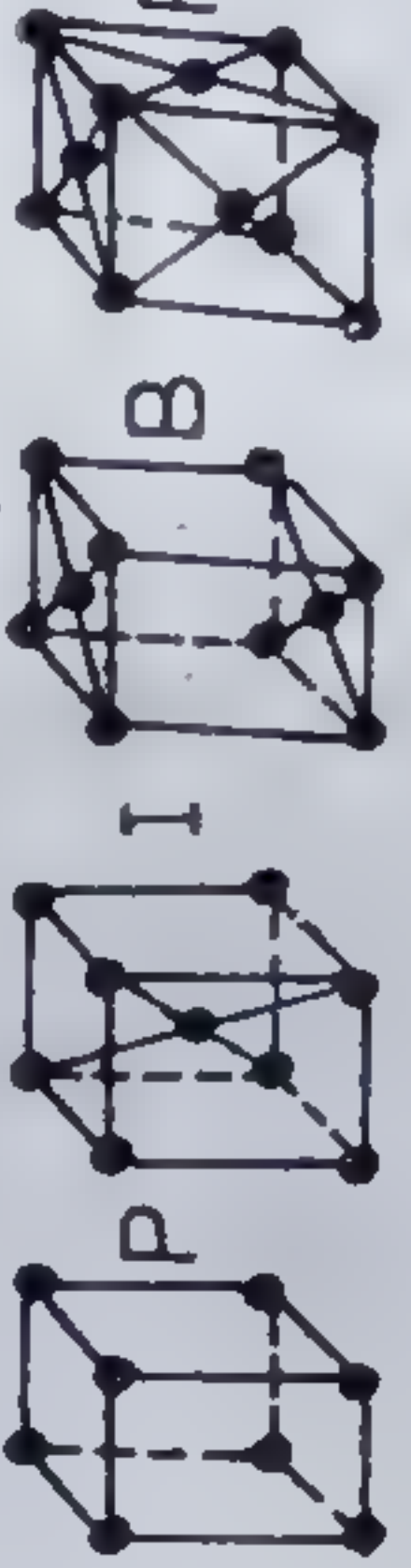
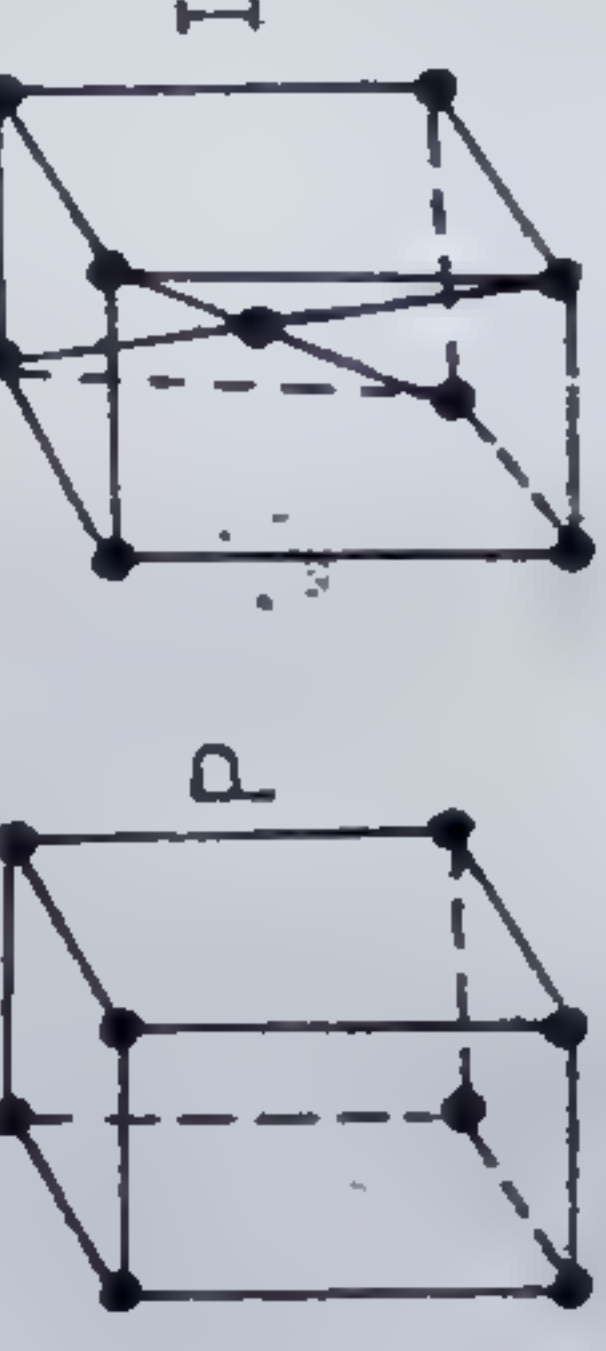
$$a'_{2x} = a_{1x} - a_{2x} = a_{2x}; \quad a'_{2y} = a_{1y} - a_{2y} = -a_{2y} \quad (11.2.22)$$

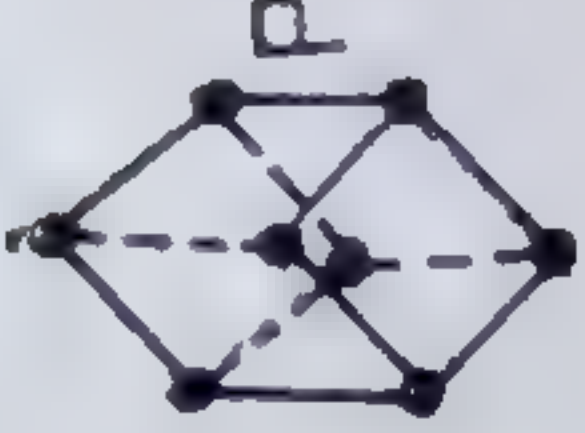
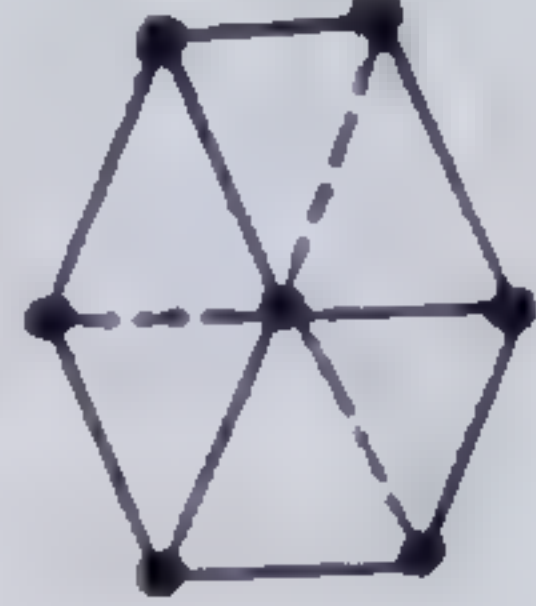

din care rezultă: $a_{1x} = 2a_{2x}$ și $a_{1y} = 0$. Deci mai putem lua o combinație de forma

$$a'_1 = a_1i; \quad a'_2 = \frac{1}{2}a_1i + a_{2y}j \quad (11.2.23)$$

care reprezintă o celulă elementară, de forma unui dreptunghi, cu un nod la intersecția diagonalelor (fig. 11.2.15, a).

Rezultă deci că în cazul sistemului monoclinic pot fi construite două celule elementare, una primitivă (P) și una cu volum centrat (I), dato-

Nr. crt.	Sistmul cristalografic (singonia)	Constantele cristaline	Celule elementare	Denumirea clasei de simetrie	Grupuri punctuale de simetrie	
					Notăția internațională	Notăția Schenflies
1.	Triclinic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$		Monoedrică Pinacoidală	$1, \bar{1}$	C_1, S_1
2.	Monoclinic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\gamma \neq \alpha = \beta = \frac{\pi}{2}$		Diedrică axială Diedrică fără axe Prismatică	2 m $\frac{2}{2}$ m	C_2 C_{1h} C_{2v}
3.	Rombic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$		Rombo-tetraedrică Rombo-piramidală Rombo-bipiramidală	222 $2mm$ m $\frac{m}{2}$ $\frac{m}{2}$ $\frac{m}{2}$	$D_2 = V$ C_{2v} $D_{2h} = V_h$
4.	Tetragonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$		Tetragonală-piramidală Tetragonală-tetraedrică Tetragonal-trapezoidală Bitetragonal-piramidală Tetragonal-bipiramidală Tetragonal-scalenoidală Bitetragonal-bipiramidală	4 $\bar{4}$ 422 $4mm$ $4/m$ $42m$ 2 $\frac{m}{2}$ $\frac{m}{2}$ $\frac{m}{2}$ 4 $\frac{m}{m}$	C_4 S_4 D_4 C_{4v} D_{2d} C_{4h} D_{4h}

5.	Trigonal (rhomboedric)	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \frac{\pi}{2}$		Trigonal-piramidală Trigonal-trapezoidală Bitrigonal-piramidală Trigonal-bipiramidală Bitrigonal-trapezoidală	$3 \overline{3}$ 32 $3m$ $2 \overline{3}$ $3 \overline{m}$	C_3 S_6 D_3 C_{3v} D_{3d}
6.	Hexagonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha = 120^\circ$ $\beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$		Romboedrică Bitrigonal-scalenoidală Hexagonal-piramidală Hexagonal-trapezoidală Bihexagonal-piramidală Hexagonal-bipiramidală Bihexagonal-bipiramidală	$6 \overline{6}$ 622 $6mm$ $6 \overline{m}$ $6m2$ $2 \overline{m}$ $6 \overline{m}$ $2 \overline{m}$ $6 \overline{m}$	C_6 C_{3h} D_6 C_{6v} C_{6h} D_{3h} D_{6h}
7.	Cubic	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$		Tritetraedrică Trioctaedrică Hexatetraedrică Bidodecaedrică Hexaoctaedrică	23 432 $2 \overline{3}$ $3 \overline{m}$ $43m$ $2 \overline{m}$ $4 \overline{m}$ $3 \overline{m}$	T O Th Ta O_h

rită faptului că rețeaua cu fețe centrate poate fi redusă la una cu volum centrat, de volum mai mic, așa cum se constată din figura 11.2.15, b (în care este redată proiecția nodurilor fețelor centrate, notate cu \times , pe baza normală la axa 2).

La sistemul rombic, celula elementară trebuie să fie de forma unui paralelipiped drept, pentru a fi compatibilă cu simetria 222. Întrucât celulele cu fețe centrate nu mai pot fi reduse la celule cu volum centrat, așa cum se vede din figura 11.2.16, a (nu se mai obține o celulă dreaptă), vor exista celule de tip (P) , (I) , (B) și (F) (vezi tabelul 11.2.1). În schimb, la sistemul tetragonal celulele elementare, având baze de forme pătratice, dacă aceste baze sînt centrate se vor putea reduce la celule simple (fig. 11.2.4, c). De aceea, la acest sistem vor exista numai celule (P) și (I) . La sistemul trigonal și hexagonal există de asemenea cîte o sim-

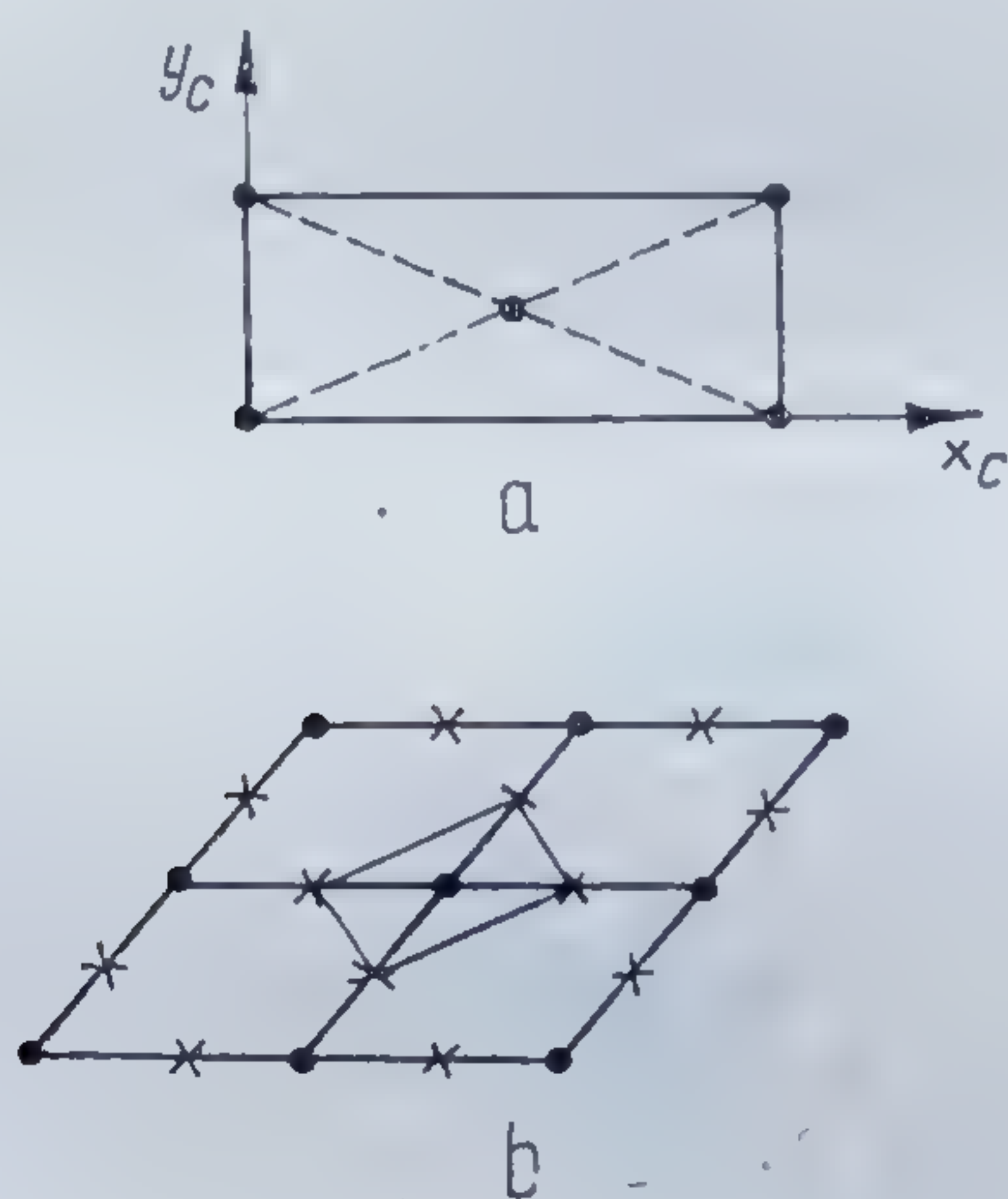


Fig. 11.2.15

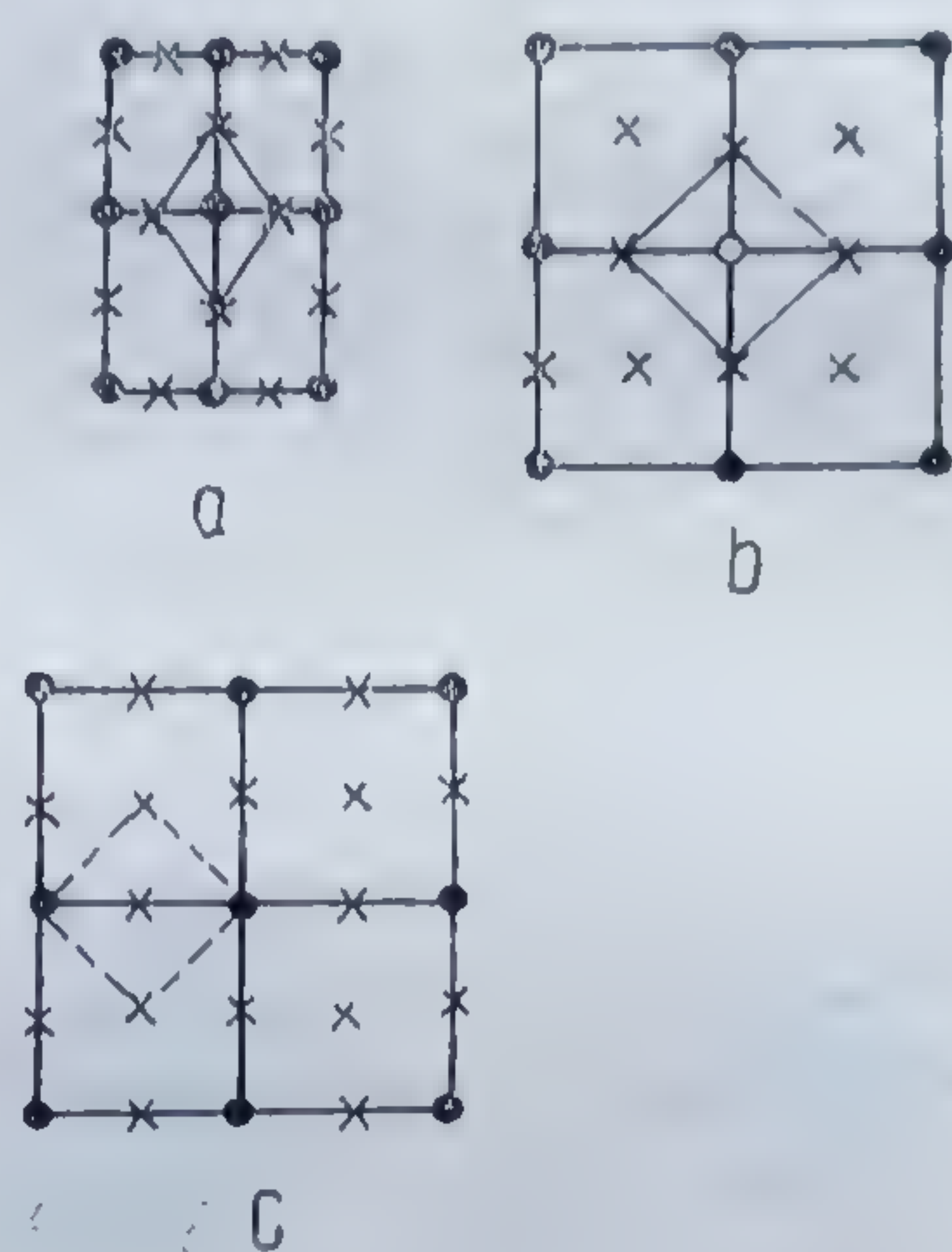


Fig. 11.2.16

gură celulă elementară de tip P , iar la sistemul cubic, trei tipuri de celule (P) , (I) și (F) . În total există deci 14 tipuri distincte de celule elementare, respectiv 14 tipuri de rețele Bravais, compatibile cu operațiile de simetrie ale celor 32 grupuri punctuale de simetrie.

De consemnat că grupurile punctuale de simetrie descriu forma poliedrică exterioară a cristalului, respectiv particularitățile macrostructurii cristaline, cum sînt cele care determină anizotropia cristalină. Pentru a descrie însă și particularitățile microstructurii cristaline este nevoie să ținem seama și de simetriile care se obțin prin combinarea simetriilor descrise mai sus, cu translația. Dar dacă la operațiile de simetrie punctuale se adaugă translația atunci se mai pot imagina încă două operații de simetrie distincte, care sînt compatibile cu rețeaua cristalină. Acestea sînt *roto-translația* (sau *axa elicoidală*) și *planul de alunecare*, care combină rotația, respectiv reflexia, cu translația. Aceste operații de simetrie sînt

schitate în fig. 11.2.17. Se pot deci construi grupuri de roto-translație în care înaintarea pe elicoidă să se facă cu distanța

$$t_{nk} = \frac{k}{n} a \quad (11.2.24)$$

n reprezentînd axa de rotație, iar k numărul de noduri existente pe elice, la o rotație completă (desigur pentru un n dat, $k = 1, 2, \dots, n$)

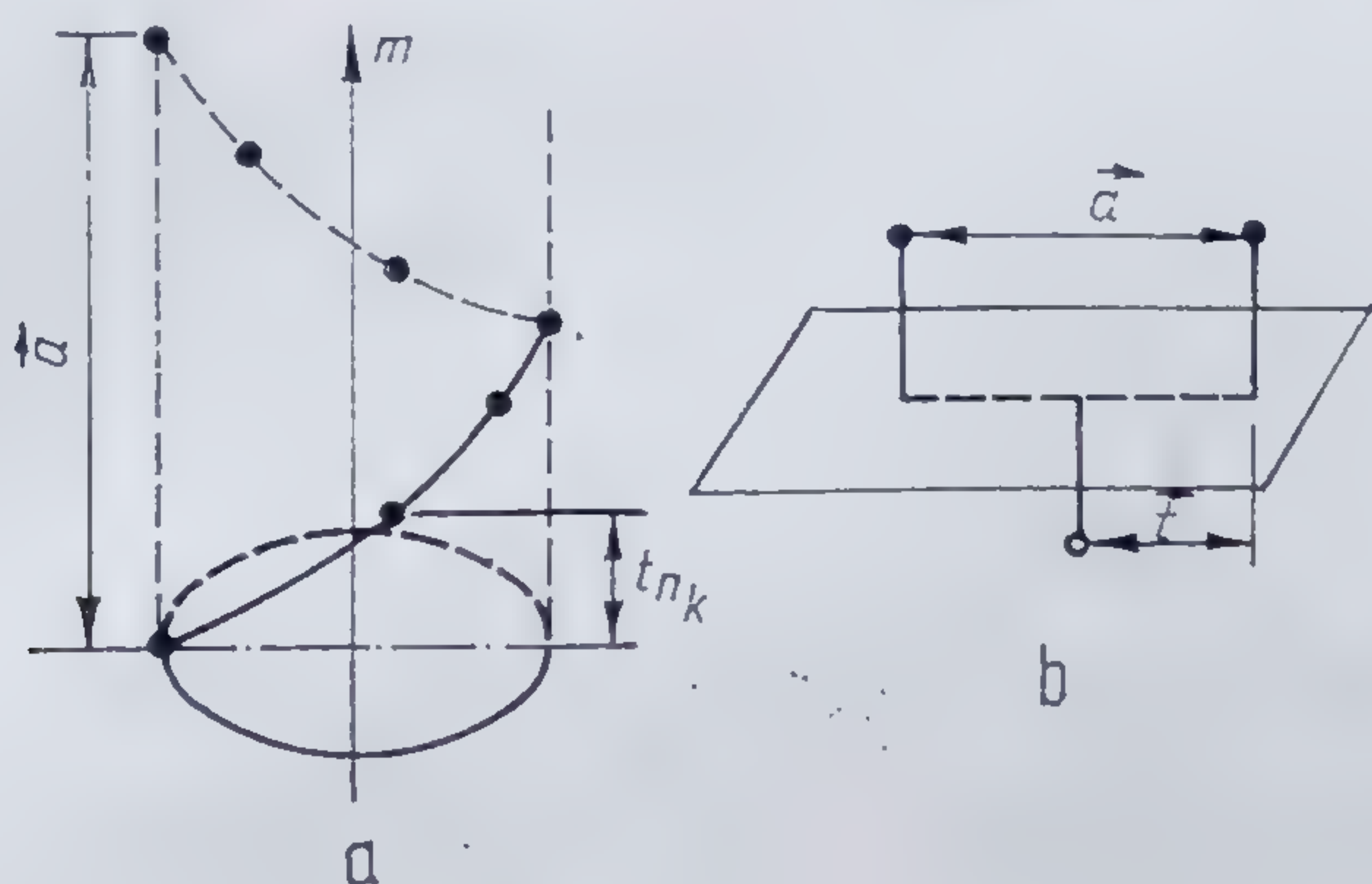


Fig. 11.2.17

Combinînd toate grupurile de rotație cu translația se vor obține 73 de grupuri spațiale de simetrie de forma n_k , iar combinînd toate grupurile punctuale care conțin plane de reflexie cu translația se obțin 157 grupuri spațiale de forma m_i . În total vor fi deci 230 de grupuri spațiale de simetrie, identificate încă din anul 1910, de către E. S. Fedorov.

11.2.3. REPREZENTAREA SIMETRIILOR REȚELELOR CRISTALINE PRIN GRUPURI ȘI CLASE DE SIMETRIE

În §11.2.1 s-a arătat că operațiile de simetrie ale rețelelor cristaline formează grupuri de simetrie, definite în sens matematic [42]. O să arătăm aici că cele h elemente ale unui grup de simetrie se separă pe clase de simetrie c_i , o clasă fiind constituită din g_i elemente care se obțin prin transformări de similitudine, de forma:

$$B = X^{-1}AX \quad (11.2.25)$$

X și A fiind două elemente oarecare ale grupului. Se spune că grupul de simetrie se factorizează în clase de simetrie, un grup putîndu-se factoriza în h/g_i clase de simetrie.

Operația de stabilire a claselor de simetrie, deși ușoară, este destul de laborioasă. Vom exemplifica acest lucru pe cazul grupului $3m$, folosind

reprezentarea stereografică dată în figura 11.2.18. În această figură, prin E s-a notat elementul unitate (operația care suprapune un element al rețelei peste el însuși, prin rotirea cu 2π), prin m_1, m_2, m_3 — cele trei plane de reflexie, iar prin (Δ) axa de rotație 3. Operațiile de rotire în sens orar (+) vor fi considerate operații directe, iar cele în sens antiorar (—), ca operații inverse. Pe figură sînt notate cele 6 operații, care-l transpun pe E în punctele: 3 după o rotație cu $2\pi/3$; m_1 după reflexia în planul m_1 ș. a. m. d.

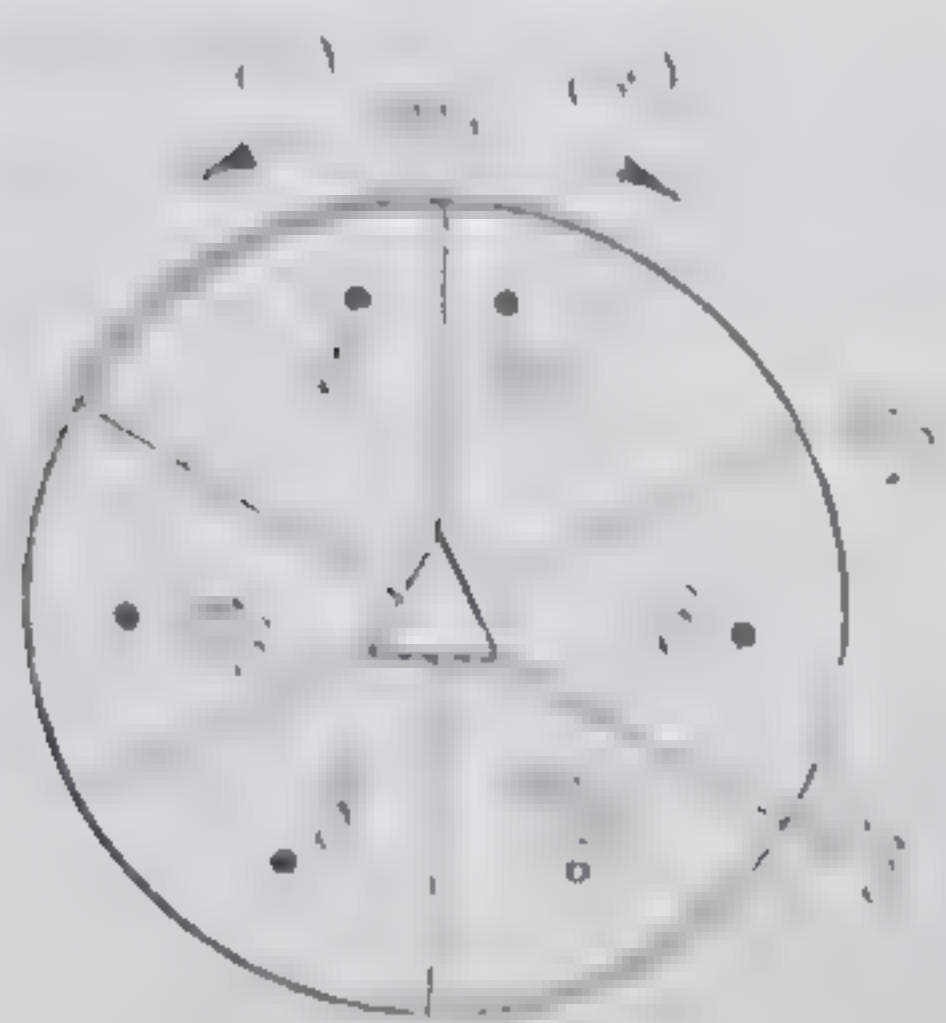


Fig. 11.2.18

Cu puțină dexteritate se poate construi o tablă de multiplicare a grupului, respectiv un tabel de constituire a claselor de simetrie. Se observă că grupul $3m$ se factorizează în 3 clase de simetrie, prima clasă c_1 fiind formată dintr-un singur element (E), a doua c_2 din două elemente (3 și 3^{-1}), iar a treia c_3 din trei elemente (m_1, m_2, m_3). De notat că toate elementele dintr-o clasă se trans-

formă unul în celălalt, prin transformări de forma (11.2.25), aceste transformări fiind realizate de oricare dintre elementele grupului.

	E	3	3^{-1}	m_1	m_2	m_3
E	E	3	3^{-1}	m_1	m_2	m_3
3	3	3^{-1}	E	m_2	m_3	m_1
3^{-1}	3^{-1}	E	3	m_3	m_1	m_2
m_1	m_1	m_3	m_2	E	3^{-1}	3
m_2	m_2	m_1	m_3	3	E	3^{-1}
m_3	m_3	m_2	m_1	3^{-1}	3	E

$x^{-1}Ax$	E	3	3^{-1}	m_1	m_2	m_3	g_i
$x^{-1}Ex$	E	E	E	E	E	E	1
$x^{-1}3x$	3	3	3	3^{-1}	3^{-1}	3^{-1}	2
$x^{-1}3^{-1}x$	3^{-1}	3^{-1}	3^{-1}	3	3	3	
$x^{-1}m_1x$	m_1	m_2	m_3	m_1	m_3	m_2	3
$x^{-1}m_2x$	m_2	m_3	m_1	m_3	m_2	m_1	
$x^{-1}m_3x$	m_3	m_1	m_2	m_2	m_1	m_3	

Dar o transformare de forma (11.2.25) este similară transformării (11.2.14), în care intervin matricele rotației. S-a văzut că o astfel de transformare, numită *transformare de similitudine*, nu modifică elementele de pe diagonala matricei. De aceea, toate elementele care aparțin unei clase de simetrie vor avea, în reprezentarea prin matrice, aceleași elemente pe diagonala respectivelor matrice. Atunci, toate elementele dintr-o clasă de simetrie sînt echivalente între ele, clasele de simetrie numindu-se din această pricină și *clase de echivalență*.

Desigur că proprietățile de simetrie ale rețelelor cristaline se relevă prin proprietățile fizice ale structurilor cristaline, respectiv ale sistemelor de microparticule care populează nodurile rețelei cristaline, formînd *baza structurii* respective. Există diverse modalități de a preciza poziția, planul reticular sau direcția de așezare a acestor microparticule într-o structură cristalină, cea mai des folosită fiind a indicilor Miller.

Indicii Miller formează un set de trei numere întregi, care se obțin în felul următor: se marchează prin O_1, O_2, O_3 punctele în care pla-

mul reticular (P) intersectează axele cristaline Ox_c , Oy_c , Oz_c (fig. 11.2.19) ale rețelei cristaline, de constante a_1 , a_2 , a_3 și se fac apoi rapoartele a_1/OC_1 ; a_2/OC_2 ; a_3/OC_3 . Luând drept unitate valoarea celui mai mic

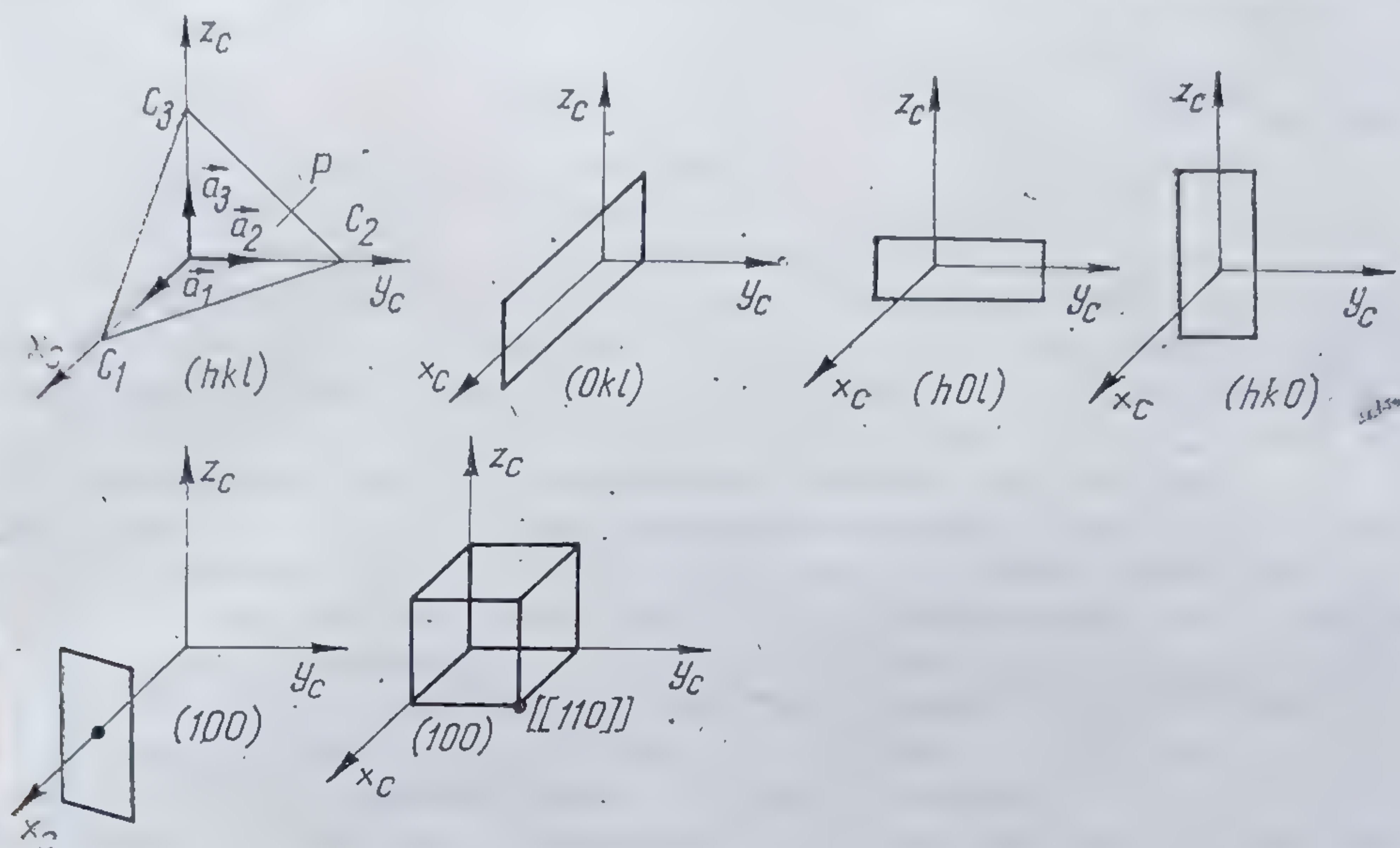


Fig. 11.2.19

dintre aceste rapoarte se vor obține trei numere întregi (hkl), care formează indicii Miller ai planului P . De exemplu, dacă $OC_1 = \frac{1}{2} a_1$,

$OC_2 = \frac{1}{2} a_2$ și $OC_3 = a_3$ vom avea (hkl) = (221). În figura 11.2.19

sînt prezentați indicii Miller pentru cîteva plane (hkl), direcții $[hkl]$ și poziții $[[hkl]]$, dintr-o structură cristalină.

De remarcă că baza unei structuri cristaline nu realizează „umplerea” compactă a rețelei cristaline, nici chiar în cazul cînd respectiva bază este constituită din particule de formă sferică, aflate în contact una cu alta (fig. 11.2.20). Un grad maxim de umplere se obține pentru rețelele cubice cu fețe centrate și pentru cele hexagonale, acest grad de umplere fiind de 74%. Urmează apoi structurile cubice cu volum centrat, cubice simple, gradul de umplere scăzînd treptat odată cu simetria cristalului. Aceasta explică de ce sînt mai frecvente structurile ale căror grade de umplere sînt mai mari. Cu

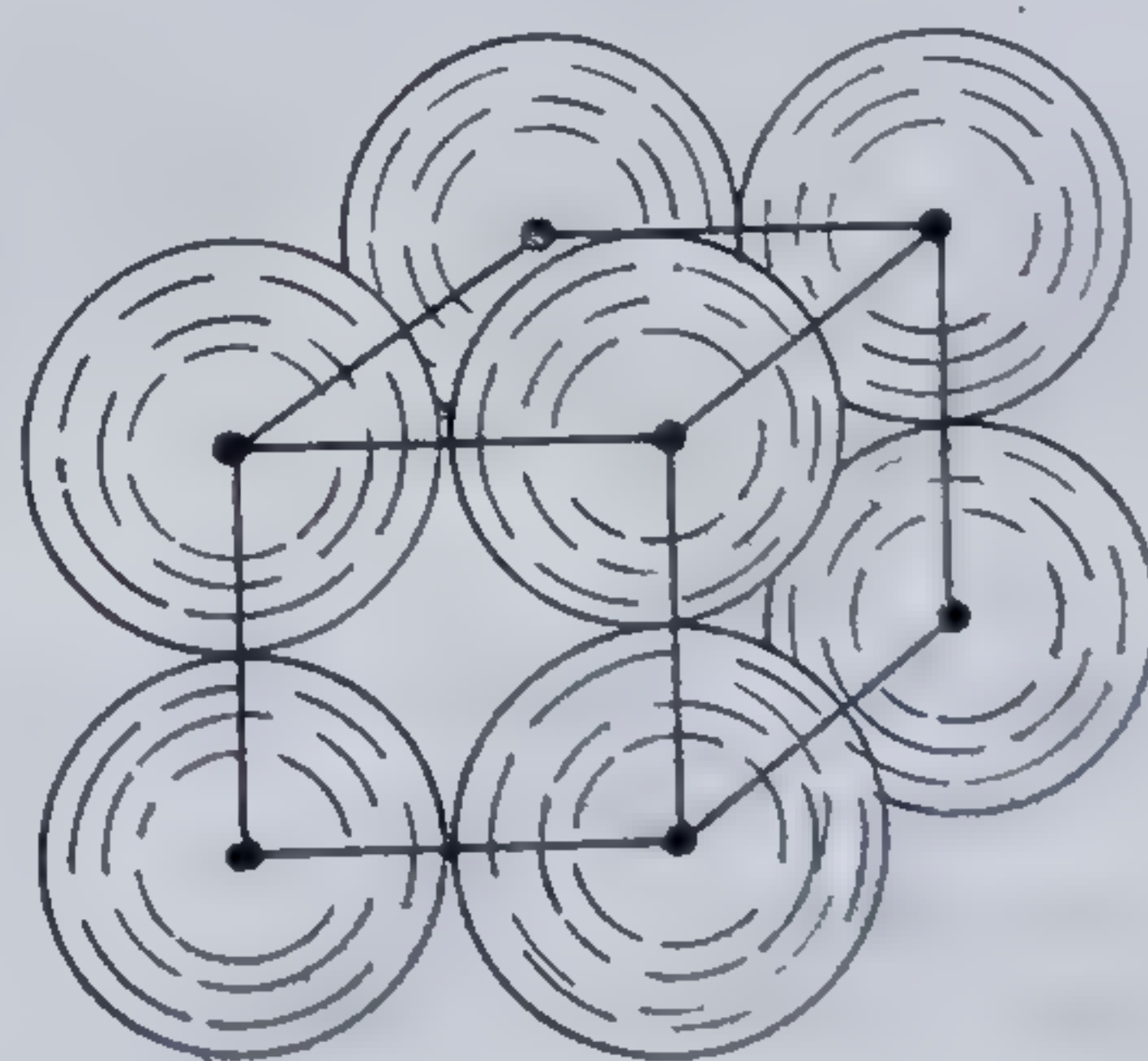


Fig. 11.2.20

cît acest grad de umplere este mai ridicat, cu atît va crește și stabilitatea respectivei structuri.

În general compactitatea solidelor este mai ridicată decît a lichidelor, excepție de la această regulă făcînd doar apa, care așa cum se știe, are o densitate maximă la $+4^{\circ}\text{C}$ (din cauză că moleculele dipolare de apă se ordonează „cap la cap” în faza solidă (în gheață), dar își pot întrepătrunde reciproc ionii de H^+ în faza lichidă).

Se știe de asemenea, că aceeași bază poate umple rețele diferite, obținîndu-se structuri diferite — proprietate denumită *polimorfism*. De exemplu, Fe poate cristaliza în sistemul cubic cu fețe centrate, realizînd faza γ -Fe, și în sistemul cubic cu volum centrat, realizînd faza α -Fe. Desigur, proprietățile fizice ale celor două faze sînt întrucîtva diferite. Aceste proprietăți pot fi descrise atît clasic, cît și cuantic, prin variabile dinamice adecvate.

În cazul cînd se utilizează o descriere cuantică, operatorii cuantici atașați respectivelor variabile dinamice vor trebui să aibă valori proprii invariante și față de operațiile de simetrie ale grupurilor cristaline atașate respectivei structuri. În §8.5 s-a văzut că valorile proprii ale operatorului hamiltonian \hat{H} sînt date, în reprezentarea (E), de elementele de pe diagonala matricei (8.5.39). Suma acestor elemente reprezintă *urma matricei*, sau *caracterul* $\chi(A)$ al reprezentării. Dar, exprimarea valorilor proprii ale hamiltonianului unui sistem cuantic face apel la un set de funcții de undă proprii $\psi_n(\mathbf{r})$ ortonormate. Acest set de funcții formează o *bază* pentru respectiva reprezentare.

De menționat că în locul spațiului fizic real tridimensional se poate construi un spațiu vectorial Hilbert, care să aibă drept coordonate tocmai *vectorii de stare* $\text{ket}|n\rangle$, respectiv *funcțiile de stare proprii* $\psi_n(\mathbf{r})$. Într-un astfel de spațiu, matricea reprezentării operatorului \hat{H} va fi o matrice pătratică n — dimensională, de forma (8.5.36). Dacă printr-o transformare unitară, de forma $\mathbf{H} = \hat{S}^{-1}\hat{H}\hat{S}$, o astfel de matrice poate fi redusă la forma diagonalizată :

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} H_1^{(p_k)} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & H_2^{(p_k)} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & H_n^{(p_k)} \end{pmatrix} \quad (11.2.26)$$

în care $H_i^{(p_k)}$ sînt matrice de ordinul p_k , și acestea nu mai pot fi reduse în continuare, atunci se spune că matricele $H_i^{(p_k)}$, formează o *reprezentare ireductibilă* pentru \hat{H} . Vor exista atîtea reprezentări ireductibile cîte clase de echivalență posedă grupul de simetrie, întrucît clasele de simetrie reunesc acele elemente ale grupului care se transformă unele în altele prin transformări de similitudine de forma (11.2.25).

Rezultă atunci că funcțiile de undă $\psi_n(\mathbf{r})$, care formează baza unei reprezentări ireductibile, vor defini un spațiu Hilbert invariant față de

toate operațiile de simetrie ale grupului de simetrie, specific lui \hat{H} . Întrucât elementele de pe diagonala matricei (11.2.26) reprezintă valorile proprii ale energiei sistemului, înseamnă că se vor realiza numai acele stări proprii ale sistemului care sînt compatibile cu respectivele operații de simetrie. În felul acesta se ajunge la concluzia că stabilirea operațiilor de simetrie și a modalităților de exprimare a invarianței variabilelor cuantice față de aceste operații de simetrie sînt esențiale pentru studiul stării cristaline. Fără a intra în detaliile unei astfel de probleme [58, 105], vom schița doar cîteva dintre aspectele ei generale.

S-a văzut mai sus că un grup de simetrie posedă un număr de reprezentări ireductibile (respectiv un număr de matrice, de forma $H_{ii}^{(pk)}$ în (11.2.26) distincte) egal cu numărul de clase de simetrie în care grupul se poate factoriza. Deci l_i va fi egal cu numărul claselor de simetrie. Întrucît fiecare matrice $H_{ii}^{(pk)}$ este pătratică, vor fi necesari $\sum l_i^2$ vectori de stare pentru a forma baza unei reprezentări ireductibile, de forma (11.2.26). Dacă se notează cu $\Gamma_{\mu\nu}^{(i)}(A)$ elementul de pe linia μ și coloana ν a matricei ireductibile de ordin p_i , corespunzător operației de simetrie A , din clasa c_i , atunci pentru un grup de ordinul h , care posedă l_i clase de echivalență va fi valabilă următoarea condiție de ortonormare

$$\sum_i \Gamma_{\mu\nu}^{(i)}(A) \cdot \Gamma_{\alpha\beta}^{(j)}(A) = \frac{h}{l_i} \delta_{ij} \delta_{\mu\alpha} \delta_{\nu\beta} \quad (11.2.27)$$

Înseamnă că expresiile $\sqrt{\frac{l_i}{h}} \Gamma_{\mu\nu}^{(i)}(A)$ formează și ele un set complet de vectori ortonormați. Notînd prin :

$$\chi_i^{(i)}(A) = \sum_{\mu} \Gamma_{\mu\mu}^{(i)}(A) \quad (11.2.28)$$

caracterul (sau urma) reprezentări ireductibile „ i ”, vom obține că mărimile $\sqrt{l_i} \chi_i(A)$ formează și ele un set de vectori ortonormați. Atunci, întrucît o reprezentare reductibilă, avînd caracterul $\chi(A_j)$ se poate reduce, prin transformări de similitudine, la un anumit număr de reprezentări ireductibile

$$\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \dots \Gamma_r. \quad (11.2.29)$$

avînd caracterele $\chi_k^{(i)}(A)$, vom putea scrie :

$$\sum_j \chi(A_j) = \sum_{k=1}^r a_k \chi_k^{(i)}(A_j) \quad (11.2.30)$$

Se observă însă că :

$$\sum_j \chi(A_j) \chi_k^*(A_j) = \sum_j \sum_b a_b \chi_b \chi_k^* = h a_k$$

deci

$$a_k = \frac{1}{h} \sum \chi(E) \cdot \chi_k^*(E) = \frac{h}{h} l_i = l_i \quad (11.2.31)$$

Dar caracterele tuturor elementelor de simetrie dintr-o clasă de echivalență sînt identice între ele. Deoarece $\chi_k(E) = l_k$, respectiv $\chi(E) = h$, obținem

$$a_k = \frac{1}{h} \sum \chi(E) \chi_k^*(E) = \frac{h}{h} l_k = l_k.$$

astfel încît relația $\chi(E) = \sum a_k \chi_k(E)$ se va reduce la condiția

$$h = \sum l_k^2 \quad (11.2.32)$$

Pentru grupul $3m$, de exemplu, care posedă $h = 6$ elemente, grupate în trei clase de simetrie vom avea deci: $l_1^2 + l_2^2 + l_3^2 = 6$. Întrucît prima clasă este o clasă unitară, pentru care $l_1 = 1$, rezultă că l_2 și l_3 vor putea lua numai următoarele două valori: $l_2 = 1$; $l_3 = 2$ (sau $l_2 = 2$, $l_3 = 1$). De aceea vor exista numai două reprezentări ireductibile Γ_2 și Γ_3 unidimensionale și o reprezentare ireductibilă Γ_3 , bidimensională. Primele două corespund claselor $c(E)$ și $c(m_i)$, iar a treia clasei $c(3)$. Avînd în vedere că, în conformitate cu (11.2.10), pentru o rotație cu $\varphi = \frac{2\pi}{3}$

avem :

$$3 = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}; \quad 3^{-1} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$m_1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad m_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}; \quad m_3 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

înseamnă că cele trei reprezentări ireductibile sînt cele date în tabelul următor;

	E	3	3^{-1}	m_1	m_2	m_3
Γ_1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	1	-1	-1	-1
Γ_3	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$

Tabelul de caractere al unei astfel de reprezentări este de forma celei prezentate mai jos :

	E	3	3^{-1}	m_1	m_2	m_3
${}^1\Gamma_1$	1	1	1	1	1	1
${}^2\Gamma_2$	1	1	1	-1	-1	-1
${}^3\Gamma_3$	2	-1	-1	0	0	0

Cunoașterea *tablei de caractere*, în care pe coloane sînt trecute caracterele corespunzătoare diverselor clase de echivalență ale grupului, (cîteva sînt, prezentate în anexa A_5), este suficientă pentru aflarea funcțiilor (vectorilor) de stare proprii $\psi_n(\mathbf{r})$ care să constituie baza respectivei reprezentări ireductibile. Aceste funcții se pot obține dintr-o funcție arbitrară φ_1 , prin proiectarea ei în lungul respectivei reprezentări ireductibile. Dacă se cunosc numai caracterele reprezentărilor ireductibile (cele date, de exemplu, în tabelul 11.2.5.), atunci se construiește un set de funcții care sînt combinații liniare ale funcțiilor care formează baza respectivei reprezentări. Se procedează astfel :

1) Se aplică funcției φ_1 (sau funcțiilor $\psi = \sum_i \varphi_{a_i}$, dacă se pleacă cu mai multe funcții, ca în cazul metodei orbitalilor moleculari, expusă în § 10.7) operatorii $\hat{O}(A_p)$ corespunzătorii fiecărei operații de simetrie a respectivului grup și se obțin astfel h funcții, de forma

$$\hat{O}(A_p)\varphi_1 = \varphi_k. \quad (11.2.33)$$

Aceste h funcții φ_k formează o *reprezentare regulată* a grupului, care în general, este o reprezentare reductibilă. Ea va conține fiecare reprezentare ireductibilă de un număr de ori, egal cu dimensiunea respectivei reprezentări, adică

$$\Gamma_{reg} = \sum_k l_k \Gamma_k. \quad (11.2.34)$$

2) Se stabilesc caracterele reprezentării regulate și cu relația (11.2.31) se deduc reprezentările ireductibile în care aceasta se descompune.

3) Se calculează funcțiile de stare pentru fiecare reprezentare ireductibilă, adică $\Gamma_p \varphi_k \chi(A_p)$ și se normează aceste funcții.

4) Cu ajutorul funcțiilor φ_k normate se calculează elementele de matrice $H_k^{(p)}$ și se constituie determinantul secular (10.7.36).

Vom exemplifica această tehnică pe cazul simplu al acetilenei, expus în § 10.7. Molecula C_2H_2 , fiind o moleculă liniară, va aparține grupului de simetrie 2 și deci va avea un tabel de caractere de forma de mai jos :

2	E	2
Γ_1	1	1
Γ_2	1	-1

Se observă că intervin două reprezentări ireductibile unidimensionale (Γ_1 și Γ_2). Pentru a obține reprezentarea regulată, vom folosi cele două funcții φ_A și φ_B , care pot fi orbitalii atomici ai atomilor de H situați în pozițiile A, respectiv B ale moleculei de $(A - B)$. Aplicând acestor două funcții operațiile E și 2 se obține rezultatul prezentat în următorul tabel

E	2
φ_A	φ_B
φ_B	φ_A
$\chi=2$	-1

în care numărul χ de sub fiecare coloană arată de câte ori se transformă funcția φ_1 în ea însăși. Acest număr constituie deci caracterul respectivei reprezentări regulate.

Cu ajutorul relației (11.2.31) se vor obține imediat reprezentările ireductibile în care se decompune această reprezentare regulată, adică:

$$a_k = \frac{1}{h} \sum_j \chi_k(A_j) \chi_k^*(A_j) \Rightarrow \begin{cases} a_1 = \frac{1}{2} (2 \cdot 1 + 0 \cdot 1) = 1 \\ a_2 = \frac{1}{2} (2 \cdot 1 + 0 \cdot (-1)) = 1, \end{cases} \quad (11.2.35)$$

Rezultă deci că $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2$, fiecare reprezentare ireductibilă fiind unidimensională. Funcțiile de undă care formează baza acestor două reprezentări ireductibile se obțin acum ușor din expresiile:

$$\varphi_1 = \sum_j A_j \varphi_A \chi_k(A_j) = E \varphi_A \chi_1(E) + 2 \varphi_A \chi_1(2) = \varphi_A + \varphi_B \quad (11.2.36)$$

$$\varphi_2 = \sum_j A_j \varphi_B \chi_k(A_j) = E \varphi_B \chi_2(E) + 2 \varphi_B \chi_2(2) = \varphi_A - \varphi_B$$

iar prin normarea acestor funcții rezultă expresiile (10.7.29) ale celor doi orbitali moleculari, care sînt invarianți față de operațiile de simetrie ale grupului 2.

Desigur că pentru cazul general calculele sînt mult mai complexe. Se poate pleca și de la o funcție φ_1 de formă generală, cum sînt funcțiile sferice

$$\varphi_1 = Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi) \quad (11.2.37)$$

în care $\Theta(\theta)$ și $\Phi(\varphi)$ sînt date de expresiile (10.2.53) și (10.2.51), sau de la o funcție de forma:

$$\varphi(x, y, z) = \sum_{ijk} a_{ijk} [x^i y^j z^k - f(r^{i+j+k})] \quad (11.2.38)$$

utilă îndeosebi pentru studiul sistemelor cu simetrie cubică. „Proiec-tarea” acestor funcții, în lungul unei reprezentări ireductibile înseamnă operația de transformare pe care o suferă funcția generatoare $\varphi(\mathbf{r})$ sub acțiunea unui operator de proiectare $\hat{P}_{\mu\mu}(A_j)$, definit prin expresia:

$$\hat{P}_{\mu\mu}(A_j) = \frac{l_i}{h} \sum \Gamma_{\mu\mu}^{(i)}(A_j^{-1}) \hat{O}(A_j) \quad (11.2.39)$$

unde $\hat{O}(A_j)$ este un operator de transfer care transformă funcția $\varphi(\mathbf{r})$ în $\varphi(A_j^{-1}\mathbf{r})$, adică dintr-o funcție generatoare $\varphi(\mathbf{r})$, generează o repre-zentare regulată de h funcții, corespunzătoare fiecărui element de sime-trie a grupului în parte. Deci

$$\hat{P}_{\mu\mu}^{(i)}(A_j) \varphi(\mathbf{r}) = \frac{l_i}{h} \sum_j \Gamma_{\mu\mu}^{(i)}(A_j^{-1}) \hat{O}(A_j) \varphi(\mathbf{r}) = \frac{l_i}{h} \sum \Gamma_{\mu\mu}^{(i)}(A_j^{-1}) \varphi(A_j^{-1}\mathbf{r}). \quad (11.2.40)$$

Introducînd acum un nou operator \hat{Q}_i , definit prin expresia

$$\hat{Q}_i = \sum_j \hat{P}_{\mu\mu}^{(i)}(A_j) = \frac{1}{h} \sum_i \chi^*(A_j) \hat{O}(A_j) \quad (11.2.41)$$

se observă că din funcția $\varphi(\mathbf{r})$ va rezulta o combinație liniară de funcții, de forma:

$$\varphi_k = \sum_j \varphi_{\mu\nu}^{(i)} = \sum_j \Gamma_{\mu\nu}^{(i)}(A_j^{-1}) \varphi(A_j^{-1}\mathbf{r}). \quad (11.2.42)$$

care formează tocmai baza pentru respectiva reprezentare ireductibilă. De remarcat că numărul de funcții proprii φ_k ne va da atît numărul de stări proprii ale sistemului cuantic, cît și degenerarea acestor stări, întrucît dacă reprezentarea ireductibilă este unidimensională, ei îi va corespunde un grad de degenerare $g = 1$, celor bidimensionale le va corespunde $g = 2$, ș. a. m. d. În felul acesta, cunoașterea grupurilor de sime-trie, a claselor de echivalență și a tablelor de caractere face posibilă afla-reă funcțiilor de stare proprii ale sistemului. Aceasta constituie atît baza reprezentărilor ireductibile ale grupurilor de simetrie, cît și funcțiile cu ajutorul cărora se vor putea calcula valorile proprii ale variabilelor dina-mice specifice respectivului sistem cuantic (pentru detalii vezi [57, 67]).

11.2.4. REȚELE RECIPROCE

În studiul proprietăților fizice ale stării solide este util să folo-sim și așa numitele *rețele reciproce sau inverse*, care fac posibilă o repre-zentare „geometrizată” a stărilor energetice ale microparticulelor din solid. Aceste rețele se construiesc pe trei vectori de bază $\mathbf{b}_j (j = 1, 2, 3)$.

definiți prin relații de forma

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{V_0} (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3); \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{V_0} (\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1); \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{V_0} (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \quad (11.2.43)$$

în care

$$V_0 = \mathbf{a}_1 (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) \quad (11.2.44)$$

reprezintă volumul celulei elementare a rețelei cristaline. Întrucât :

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}; \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (11.2.45)$$

rezultă că rețeaua, construită pe vectorii de bază \mathbf{b}_j va fi o rețea inversă celei construită pe vectorii de bază \mathbf{a}_i (se observă că $\mathbf{b}_j = \frac{2\pi}{\mathbf{a}_i}$). De aceea, fiecărui tip de rețea cristalină îi va corespunde o rețea inversă, existînd tot 14 tipuri distincte de rețele reciproce.

Pentru a găsi forma celulelor elementare ale acestor rețele inverse, vom defini prin \mathbf{G} un vector al rețelei inverse, în felul următor

$$\mathbf{G} = l_1 \mathbf{b}_1 + l_2 \mathbf{b}_2 + l_3 \mathbf{b}_3 = (l_1 l_2 l_3) \begin{pmatrix} b_{1x} & b_{1y} & b_{1z} \\ b_{2x} & b_{2y} & b_{2z} \\ b_{3x} & b_{3y} & b_{3z} \end{pmatrix} = \langle \mathbf{l} | \mathbf{B} \quad (11.2.46)$$

unde prin $\langle \mathbf{l} | = (l_1 l_2 l_3)$, s-a notat un „vector linie”, iar prin \mathbf{B} — matricea triedrului de bază al rețelei inverse (analogă lui \mathbf{A} , dată prin (11.2.2)). Avînd în vedere relațiile (11.2.45), rezultă că :

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{A} = 2\pi \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = 2\pi \mathbf{I}, \quad (11.2.47)$$

\mathbf{I} fiind matricea unitară. Deci

$$\mathbf{B} = 2\pi \mathbf{A}^{-1} \quad (11.2.48)$$

\mathbf{A}^{-1} reprezentînd matricea inversă matricei \mathbf{A} (vezi anexa 2), adică :

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{|\det \mathbf{A}|} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} \quad (11.2.49)$$

În această ultimă expresie prin A_{ij} s-au notat minorii elementelor a_{ij} din matricea (11.2.2), iar $|\det \mathbf{A}|$ reprezintă valoarea absolută a determinantului principal al matricei \mathbf{A} .

Deci, prin calcule relativ simple, din matricea triedrului de bază \mathbf{A} a rețelei directe se va obține matricea triedrului de bază \mathbf{B} a rețelei inverse. De exemplu, pentru rețele cubice, plecând de la expresiile (11.2.3) găsim :

— pentru cub simplu

$$\mathbf{B}_{cs} = \begin{pmatrix} \frac{1}{a} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{a} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{a} \end{pmatrix} \quad (11.2.50)$$

ceea ce înseamnă că celula elementară a rețelei inverse este tot un cub simplu (fig. 11.2.20, a);

— pentru cub cu volum centrat

$$\mathbf{B}_{cvc} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{a} & \frac{1}{a} \\ \frac{1}{a} & 0 & \frac{1}{a} \\ \frac{1}{a} & \frac{1}{a} & 0 \end{pmatrix} \quad (11.2.51)$$

celula elementară fiind în acest caz un octaedru trunchiat (dodecaedru) (fig. 11.2.21, b). În mod analog se găsește că rețeaua inversă a rețelei cubice cu fețe centrate posedă o celulă elementară de forma unui octaedru

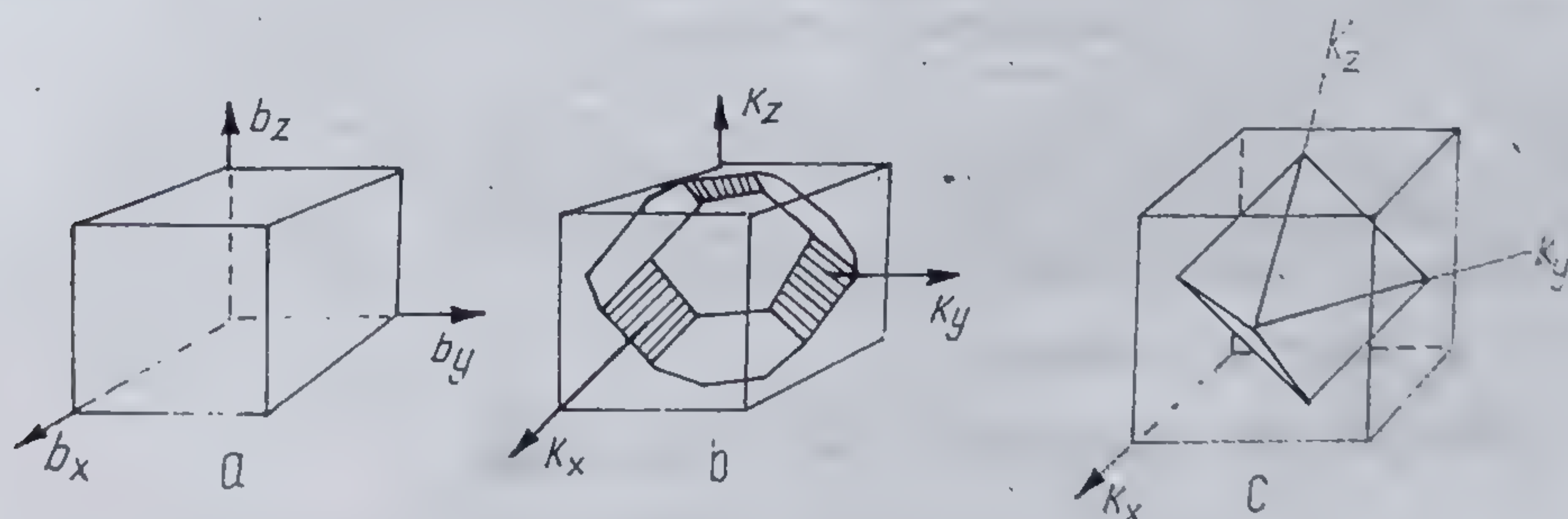


Fig. 11.2.21

(fig. 11.2.21, c). Aceste celule elementare ale rețelei inverse se mai numesc și *prime zone Brillouin*, așa cum s-a menționat în § 8.8.5.

De reținut că dacă setul celor trei numere $(l_1 l_2 l_3)$ este format tocmai din indicii Miller (hkl) ai rețelei cristaline, atunci vectorul :

$$\mathbf{G}_m = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3 \quad (11.2.52)$$

se numește *vector Miller*. Acest vector se bucură de proprietatea că are direcția normală la planul reticular (hkl) și modulul

$$|\mathbf{G}_m| = \frac{1}{2\pi \cdot d_{(hkl)}} \quad (11.2.53)$$

$d_{(hkl)}$ fiind distanța minimă dintre planele reticulare (hkl) .

11.2.5. METODE EXPERIMENTALE DE STUDIU AL SIMETRIILOR INTERIOARE ALE STĂRII SOLIDE

Simetria interioară a stării solide poate fi studiată prin metodele de difracție ale radiațiilor X, a electronilor și neutronilor, metode rezultate din studiile teoretice ale lui Max von Laue, făcute în anul 1912. Aceste studii au condus la concluzia că radiațiile X trebuie să producă fenomene de difracție pe rețelele cristaline naturale, întocmai cum lumina se difractă pe rețelele optice. În §7.4 s-a arătat că în cazul difracției radiațiilor X, maximele de difracție apar pe acele direcții θ față de planul reticular (hkl) al rețelei, pentru care este îndeplinită condiția Bragg (7.4.36), adică:

$$2d_{(hkl)} \sin \theta = n\lambda; \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad d_{(hkl)} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a_1^2} + \frac{k^2}{a_2^2} + \frac{l^2}{a_3^2}}}. \quad (11.2.54)$$

Astăzi, se știe că în fenomenele de difracție a radiațiilor X pe monocristale intervin procese de difuzie coerentă a acestor radiații pe orbitalii electronici ai bazei, situați în nodurile rețelei cristaline, radiațiile difuzate amplificându-se (prin interferență) pe direcțiile date de formula lui Bragg (11.2.54). Aceste difuzii coerente vor determina și intensitatea franjelor de difracție. Dacă se definește un *factor de difuzie atomică* f , care să exprime raportul dintre amplitudinea undelor difuzate de atomul situat în centrul sistemului de referință și amplitudinea undelor difuzate de un alt atom, situat în nodul \mathbf{R}_n al rețelei, atunci, întrucât între cele două unde va interveni o diferență de fază $\phi = \frac{2\pi}{\lambda} (\mathbf{R}_n \cdot \mathbf{e})$, în conformitate cu principiul de superpoziție, vom putea scrie

$$f = \int \rho(\mathbf{R}_n) e^{\frac{2\pi i}{\lambda} (\mathbf{R}_n \cdot \mathbf{e})}. \quad (11.2.55)$$

Mărimea

$$F(hkl) = \sum_j f_j e^{\frac{2\pi i}{\lambda} (\mathbf{R}_j \cdot \mathbf{e})} \quad (11.2.56)$$

în care sumarea se face pe toate nodurile j ale celulei elementare a rețelei, poartă numele de *factor de structură al rețelei*. El reprezintă raportul dintre intensitatea radiațiilor X difuzate de către toți atomii dintr-o celulă elementară și intensitatea radiațiilor difuzate de către atomul situat în originea sistemului de referință. Se observă că pentru atomi identici se poate scrie

$$F(hkl) = fS; S = \sum e^{2\pi i(hn_1 + kn_2 + ln_3)} \quad (11.2.57)$$

S numindu-se *factor de structură geometrică*. De remarcat că factorul de structură geometrică S se anulează pentru planele reticulare (hkl) ale căror indici Miller satisfac condiția $h + k + l = \frac{2n + 1}{2}$, $n = 0, 1, 2, \dots$,

ceea ce înseamnă că de pe aceste plane nu se vor obține reflexii Bragg. Acest rezultat este deosebit de important pentru descifrarea spectrelor de difracție a radiațiilor X pe monocristale.

După cum s-a mai menționat, în tehnicile de difracție a radiațiilor X se folosesc atât radiații monocromatice, cât și nemonocromatice. Primele se obțin prin excitarea electronilor din imediata apropiere a nucleului, când, așa cum s-a văzut în § 10.4, rezultă spectre caracteristice de tip Moseley, care satisfac o lege de forma

$$\sqrt{\nu} = A + BZ \quad (11.2.58)$$

A și B fiind constante ce depind de tipul atomului difuzant, respectiv de nivelele Roentgen, K, L, M, N, ... de pe care se emit aceste spectre. Așa, de exemplu, folosind un anticatod de Cu sau de Mo, se pot obține radiații X monocromatice, cu $\lambda_{KCu} = 1,541 \text{ \AA}$, respectiv $\lambda_{KMo} = 0,709 \text{ \AA}$, excitarea acestor spectre făcându-se prin bombardament electronic.

Radiații X nemonocromatice (numite adesea și radiații X moi sau albe) se obțin prin procese de frînare a electronilor de către un anticatod (ca în tuburile Roentgen).

Difracția neutronilor este un fenomen similar difracției radiațiilor X, în care neutronii își pun în evidență natura lor ondulatorie. Pentru neutroni de energie E , lungimea de undă a undei asociate este dată, în conformitate cu expresia (8.3.12), de

$$\lambda[\text{\AA}] = \frac{0,28}{(E[\text{eV}])^{1/2}} \quad (11.2.59)$$

astfel că pentru neutroni termici, cu $E = 0,08 \text{ eV}$, se obține $\lambda \simeq 1 \text{ \AA}$.

Astăzi există posibilități de a produce fascicule monoenergetice de neutroni într-o gamă extrem de largă de energii, începând cu neutronii ultrareci, pentru care $E \simeq 3 \cdot 10^{-7} \text{ eV}$ și mergând pînă la neutroni rapizi, cu $E = 10^7 \text{ eV}$. Dat fiind și faptul că neutronii au o mare putere de pătrundere prin substanță și că ei interacționează slab cu orbitalii electronici (interacții realizate prin intermediul momentului lor magnetic, $\mu_n = -1,939 \mu_N$, μ_N fiind magnetonul nuclear (vezi § 12.2), studiile de di-

fracție cu neutroni pe monocristale aduc informații prețioase asupra structurii interne a stării solide. Se poate defini și în acest caz un factor de structură electronică [3,92] și din determinarea acestui factor se obțin informații cu privire la structura electronică a atomilor și moleculelor din respectiva structură cristalină.

Difracția electronilor: este fenomenul în care electronii își relevă comportarea lor ondulatorie. Lungimea de undă a undei asociate va fi dată, în acest caz, de expresia

$$\lambda[\text{\AA}] = \frac{12}{(E[\text{eV}])^{1/2}}. \quad (11.2.60)$$

Spre deosebire de neutroni, electronii posedă o mică putere de penetrație prin stări condensate și, de aceea, pentru a obține fenomene de difracție cu electroni, starea solidă trebuie să aibă forma unui strat subțire (cu grosimea $d = 10^2 - 10^4 \text{\AA}$), folosindu-se tehnica microscopiei electronice [2].

Funcție de tipul radiațiilor incidente folosite (monoenergetice sau nu) au fost concepute următoarele variante experimentale de difracții pe structuri cristaline naturale:

a) **Metoda Laue**, care folosește radiații (X, e^- sau γ) cu spectru continuu și probe monocristaline (fig. 11.2.22, a). Pe fiecare plan reticular

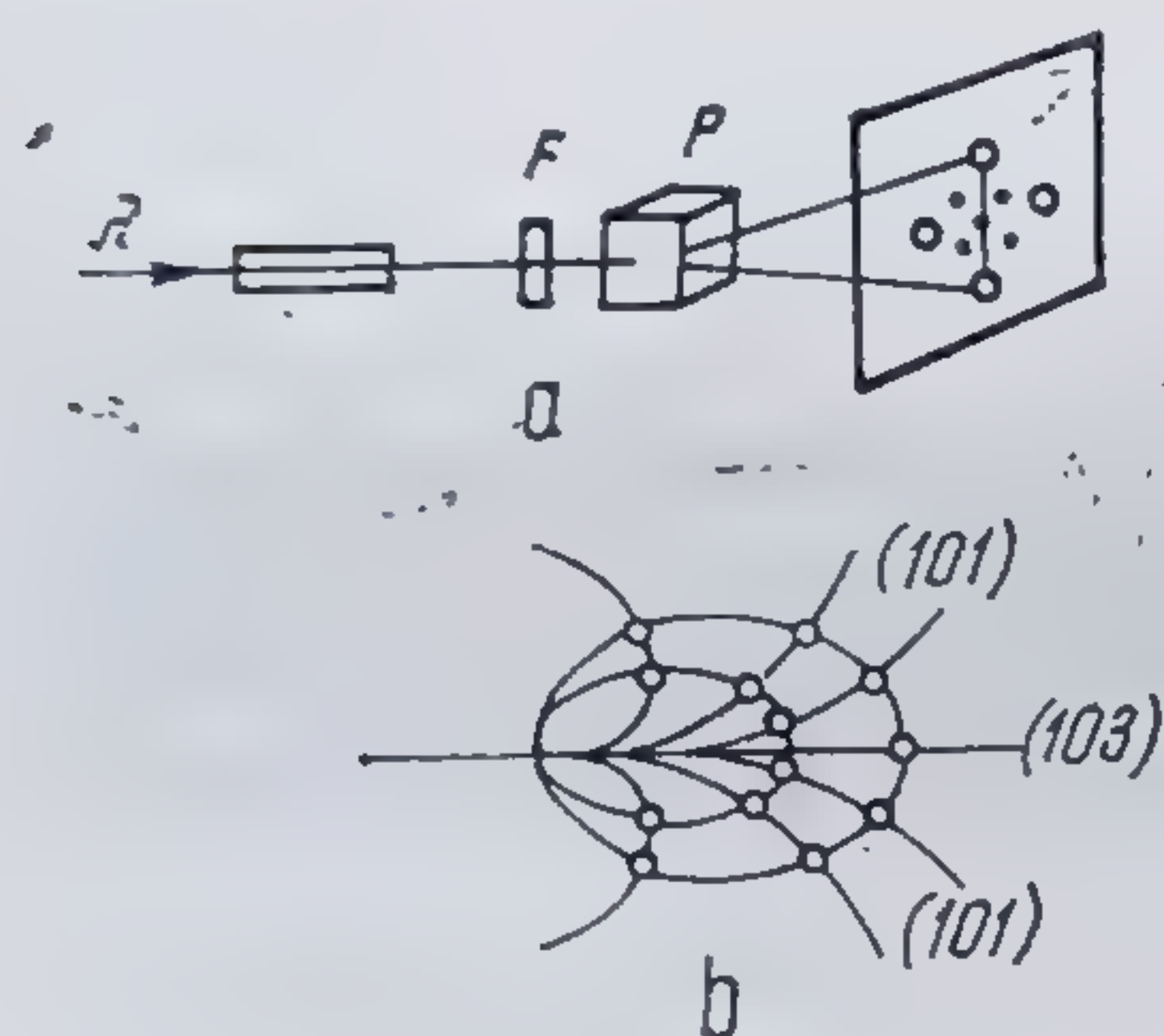


Fig. 11.2.22

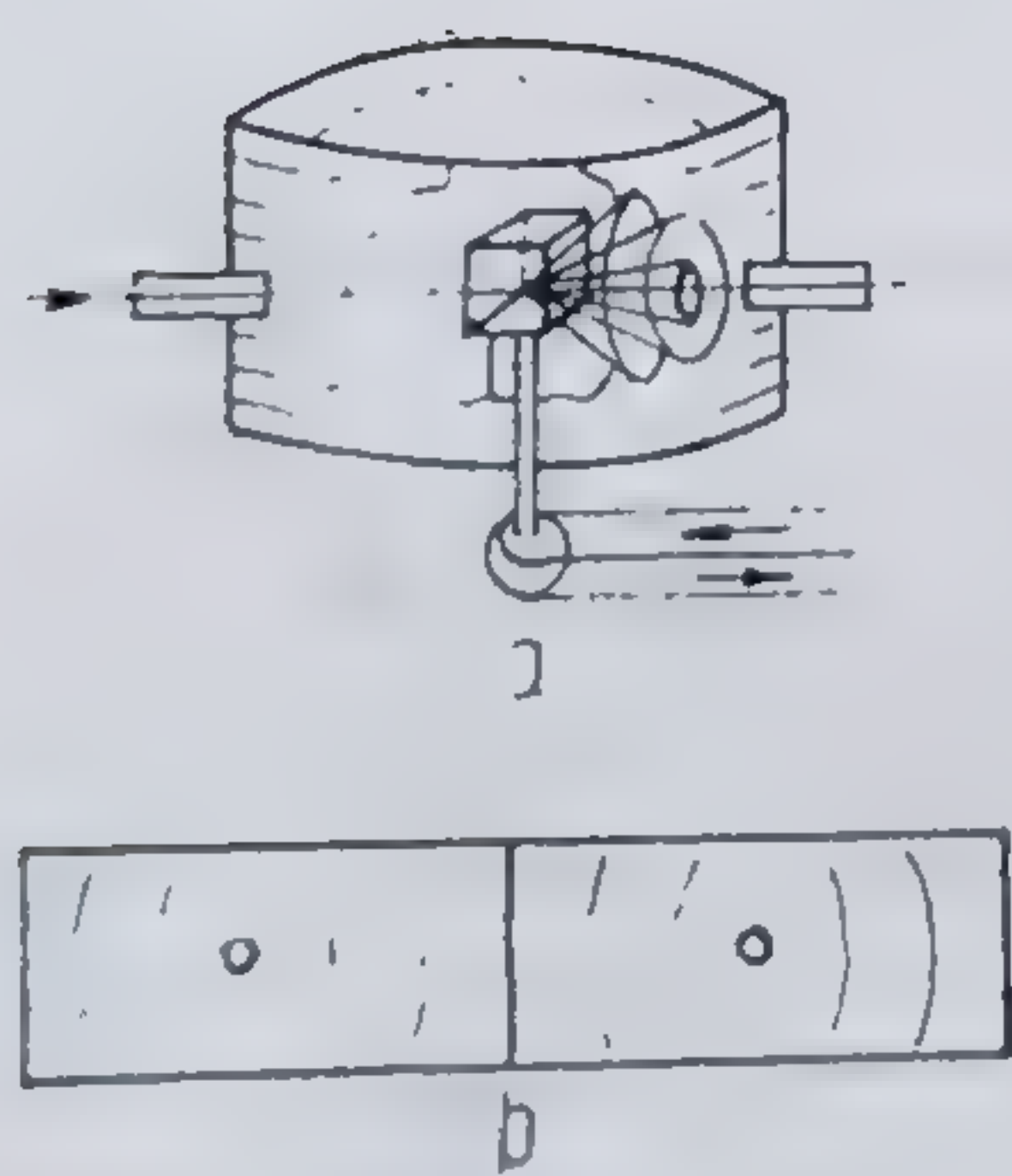


Fig. 11.2.23

(hkl) al rețelei cristaline a probei (P) se vor realiza reflexii Bragg, în conformitate cu relația (11.2.54), astfel încât pe ecranul (E) se vor obține o serie de pete, grupate pe elipse, parabole sau hiperbole (fig. 11.2.22, b), care formează o *lauegramă*. Fiecare pată evidențiază reflexia de pe un anumit plan reticular (hkl), astfel că lauegrama evidențiază simetria interioară a respectivei structuri cristaline. Există atlase de lauegrame, care permit stabilirea rapidă atât a simetriei cristaline, cât și a orientării după preferință a axelor cristaline.

b) **Metoda cristalului rotitor** utilizează tot probe monocristaline, dar fascicule monocromatice. Reflexiile Bragg se prind pe un cliseu fotografic, de formă cilindrică, ce înconjoară proba (fig. 11.2.23, a). Ele au forma unor linii (fig. 11.2.23, b), fiecare linie corespunzând reflexiei de pe un anumit plan reticular (hkl). Desigur că pe un plan (hkl) se va obține o reflexie Bragg numai dacă acesta este orientat față de direcția fasciculului incident sub un unghi θ , care satisface formula Bragg (11.2.54). Dar prin rotirea continuă a monocristalului, diversele plane reticulare (hkl) se vor găsi

în mod periodic față de fasciculul incident, sub unghiuri θ ce satisfac relația lui Bragg (11.2.54) și vor reflecta selectiv aceste radiații sub forma unor suprafețe conice, care intersectează pelicula fotografică după linii aproximativ rectilinii (fig. 11.2.22, b). Numărul, poziția și intensitatea acestor linii evidențiază tipul respectivei structuri cristaline.

De asemenea există și variante ale acestei metode în care cristalele oscilează sincron cu pelicula fotografică. O astfel de variantă este folosită mai ales la studiul structurilor foarte complexe, care dau un număr enorm de linii de difracție, cum este cazul enzimelor, de la care se înregistrează peste 10^4 linii de reflexie Bragg.

c) *Metoda Debye-Scheerer (metoda pulberilor cristaline)*: este metoda cea mai accesibilă pentru măsurători de structură, întrucât ea folosește probe policristaline, realizate sub forma unor straturi subțiri de pulbere cristalină lipită de un ax cilindric (P) (fig. 11.2.24, a). Se folosesc radiații monocromatice, reflexiile Bragg făcându-se în acest caz pe plane reticulare (hkl), pentru diverse unghiuri θ , în conformitate cu relația lui Bragg (11.2.54). Vor exista desigur o mulțime de cristalite ale căror orientări să corespundă acestei relații și, de aceea, se vor obține tot conuri de reflexii Bragg, care vor intersecta pelicula fotografică cilindrică (F) tot după linii aproximativ drepte (fig. 11.2.23 b). Au fost create tehnici perfecționate de calcul [129] care permit găsirea constantelor cristaline a_1, a_2, a_3 din poziția acestor linii.

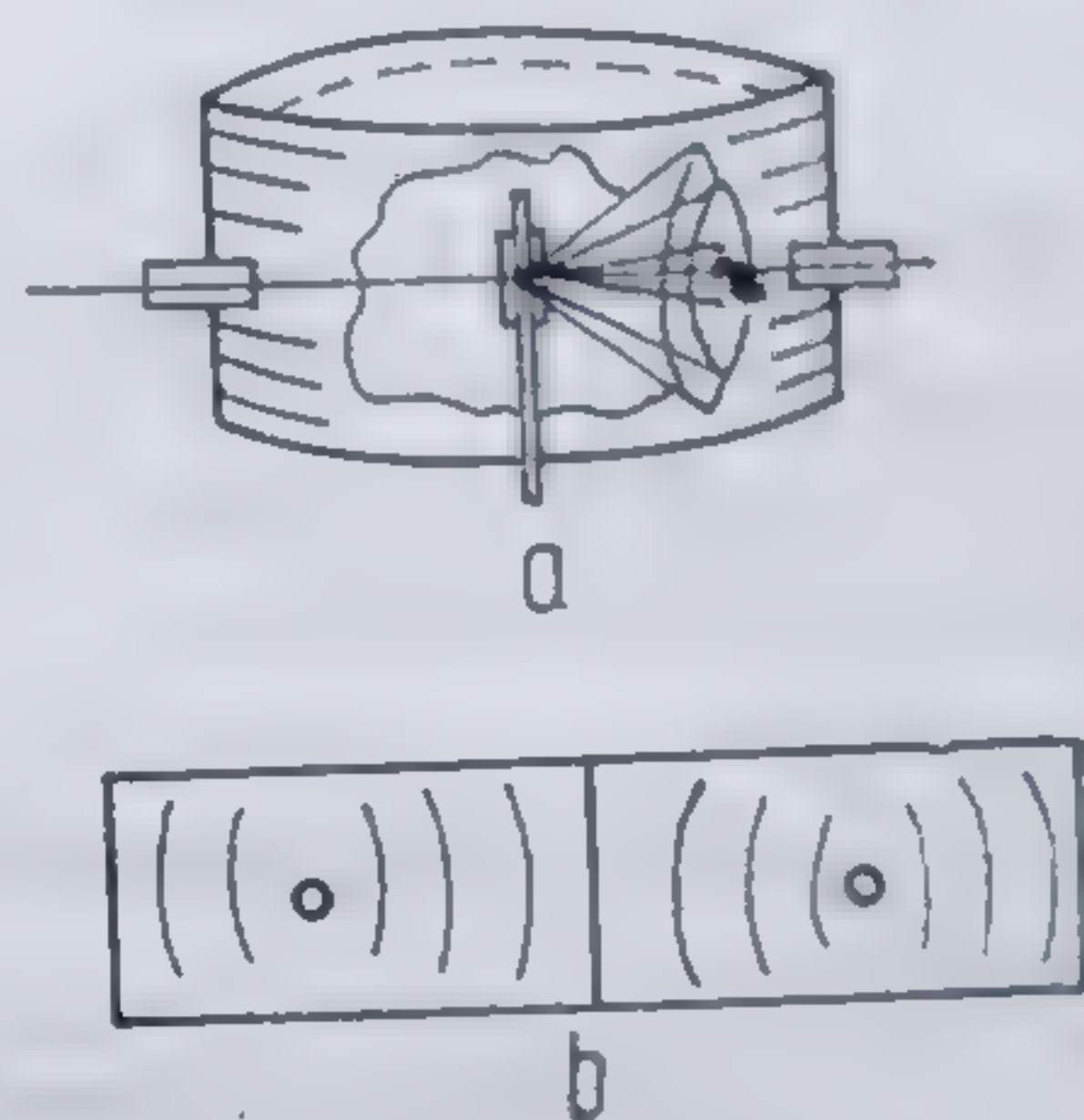


Fig. 11.2.24

11.2.6. CRISTALE REALE. DEFECTELE DE STRUCTURĂ ALE CRISTALELOR

O structură perfectă, în care fiecărui nod al rețelei să-i corespundă aceeași bază, este desigur o structură ideală, în sensul că ea nu s-ar putea realiza decât la $T \rightarrow 0$ K. Cristalele reale prezintă o serie de defecte, determinate fie de agitația termică, fie de prezența impurităților (atomi sau ioni diferiți de ai bazei care populează anumite noduri ale rețelei). Pot interveni, de asemenea, defecte de structură ale rețelei cristaline, cum sunt distorsiunile și deformările rețelei, care se răsfrâng asupra proprietăților structurii cristaline.

Cunoașterea defectelor de structură sau de compoziție ale unui cristal este de mare interes practic și tehnologic, întrucât de tipul, numărul și distribuția acestor defecte vor depinde nu numai stabilitatea mecanică și termică a respectivei structuri, ci și o serie dintre proprietățile sale fizice (mecanice, termice, electrice, magnetice și optice). Unele dintre aceste defecte, cum sunt impuritățile de substituție, pot produce modificări însem-

nate ale proprietăților structurii, chiar și în concentrații foarte mici (cum este cazul impurităților donoare și acceptoare din semiconductoare, §.11.5.2), altele determină numai schimbări mediate ale acestor proprietăți. De aceea, s-au depus eforturi deosebite atât pentru studiul teoretic și experimental al defectelor [115, 24], cât și pentru realizarea unor tehnici de omogenizare, respectiv de micșorare a numărului lor dintr-un solid. Între aceste tehnici, *tratatamentul termic*, în diverse câmpuri de forțe, îi revine un rol esențial.

Se cunosc o mulțime de tipuri de defecte în solid care se grupează în următoarele clase :

- defecte punctiforme, realizate de atomi (ioni sau molecule) interstițiali, impurități de substituție și centre de culoare ;
- defecte unidimensionale, de tipul dislocațiilor liniare ;
- defecte bidimensionale, cum sînt suprafețele interfaziale, pereții domenali la substanțele feromagnetice și chiar fețele exterioare ale corpului solid ;
- defecte tridimensionale, de tipul incluziunilor și ocluziunilor volumetrice.

a) Apariția defectelor punctiforme este determinată de faptul că nici o bază nu asigură o umplere compactă a respectivei rețele cristaline. Prezența spațiilor libere între microparticulele bazei face posibilă atât deplasarea acestor microparticule în spațiile interstițiale libere dintre noduri (fig. 11.2.25, b), cât și la suprafața corpului (fig. 11.2.25, a). Astfel de pro-

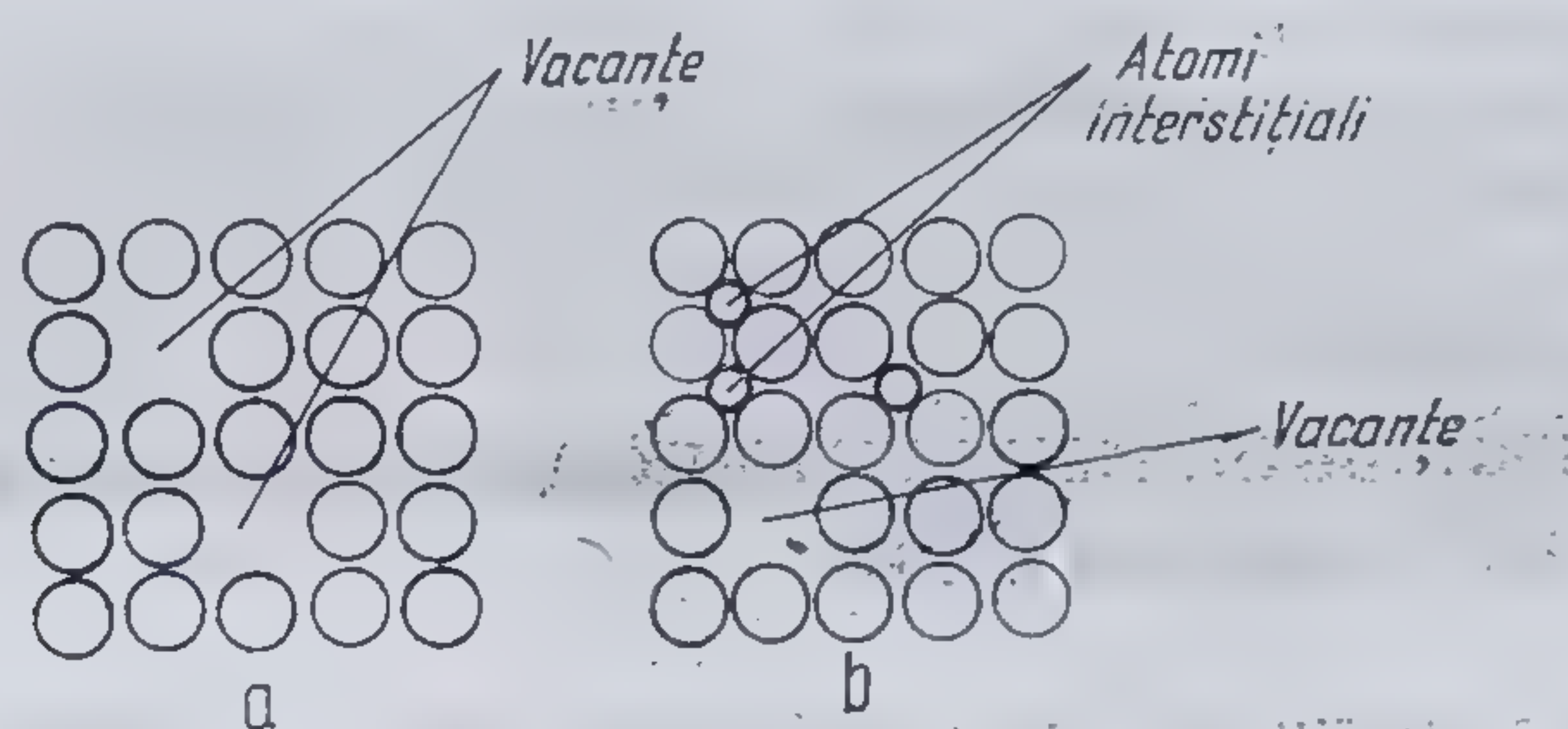


Fig. 11.2.25

cese se produc cu consum de energie, energia E_a necesară creării unui singur defect primind denmirea de *energie de activare*. În cele mai multe cazuri, această energie se cîștigă pe cale termică (prin ciocniri moleculare).

În figura 11.2.24 sînt schițate două tipuri de defecte punctiforme și anume : noduri nepopulate de bază, denumite *vacanțe* sau *defecte de tip Schotky*, și microparticule interstițiale combinate cu vacanțele din care acestea au plecat, numite *defecte de tip Frenkel*.

Dacă aceste defecte sînt produse numai de agitația termică, atunci într-o stare de echilibru termodinamic numărul defectelor din unitatea de volum va depinde numai de temperatura T , putînd fi dedus din considerente de ordin statistic. Într-adevăr, întrucît formarea unui defect înseam-

nă în același timp atît o creștere a energiei interne U a sistemului, cu valoarea

$$\Delta U = U - U_0 = nE_a, \quad (11.2.61)$$

cît și o creștere a entropiei sale S , condiția de echilibru termodinamic va asigura o valoare minimă pentru energia liberă F a sistemului. Formarea defectelor contribuie la creșterea gradului de dezordine din cristal și anume, pentru defecte de tip Schotky, dacă la n_0 noduri pe unitatea de volum se realizează n defecte (unde $n \ll n_0$ și $n, n_0 \gg 1$), atunci entropia sistemului va crește cu (vezi (5.2.43))

$$\Delta S = S - S_0 = k_b \ln W_{\text{termo}} = k_b \ln \frac{n_0!}{n!(n_0 - n)!} \quad (1.2.62)$$

Pentru energia liberă F se va obține o variație :

$$\Delta F = F - F_0 = nE_a - k_b T \ln \frac{n_0!}{n!(n_0 - n)!} \quad (11.2.63)$$

Din condiția de echilibru termodinamic $\partial(\Delta F)/\partial n = 0$, folosind și aproximația formulei lui Stirling (9.1.10), rezultă după calcule simple :

$$n = n_0 e^{-E_a/k_b T} \quad (11.2.64)$$

O relație analogă se obține și pentru defecte de tip Frenkel

$$n = \sqrt{n_1 n_2} e^{-E_a/k_b T} \quad (11.2.65)$$

n_1 și n_2 fiind numărul de atomi interstițiali, respectiv de vacanțe din cristal.

Legile exponențiale prezentate mai sus ne arată că ambele tipuri de defecte se produc spontan, iar numărul lor crește odată cu temperatura T . Pentru defecte de tip Schotky de exemplu, pentru $E_a = 1$ eV, la un kilomol de cristal ($n_0 = N_A \simeq 6 \cdot 10^{26}$) aflat la temperatura camerei ($T = 300$ K) vor exista $n \simeq 10^{-4} n_0 = 6 \cdot 10^{21}$ defecte, adică un defect la 10 000 de noduri.

În cristale ionice se pot genera atît vacanțe cationice (cînd dintr-un nod al rețelei lipsește un ion pozitiv, cum este ionul de Na^+ , din NaCl), cît și vacanțe anionice (lipsește Cl^- în structura NaCl). De regulă, producerea acestor defecte este însoțită de fenomene optice foarte interesante, unele de mare interes practic. Din cadrul acestor fenomene optice face parte colorația unor cristale. De exemplu, monocristalele de NaCl se colorează în galben, prin încălzire (colorație observată atît prin reflexie, cît și prin transmisie). Această colorație se datorește vacanțelor anionice (lipsa ionului negativ de Cl^- din anumite noduri ale rețelei), vacanțe care se comportă în cristal ca niște veritabile „gropi de potențial” pentru electronii puși în libertate, prin ionizare, de către atomii de Na. Captați în aceste gropi, electronii ocupă stări cuantice discrete (vezi § 8.8.2), putînd absorbi sau emite selectiv numai acele cuante de lumină ale căror lungimi de undă sînt determinate de diferențele dintre energia nivelelor energetice între care au

loc respectivele tranziții. Cristalul va prezenta, desigur, o colorație funcție de lungimea de undă λ a acestor cuante.

Defectele punctiforme, de tipul celor menționate mai sus se numesc *centre de culoare*. Se cunosc mai multe tipuri de centre de culoare, pentru care au fost elaborate deja metode experimentale de determinare a caracteristicilor energetice, un rol important revenind metodelor de rezonanță paramagnetică de spin. Astfel, centrul de culoare creat de o vacanță halogenică anionică (Cl^-), în care a fost captat un electron, a primit numele de *centru de tip F'* ; două centre de tip F' adiacente formează un *centru de tip M* , iar trei astfel de centre F' adiacente formează un *centru de tip R* . O vacanță cationică în care a fost captat un gol formează un *centru de tip V* .

Efecte optice interesante produc în cristale și impuritățile de substituție, unele prezentând un interes practic și teoretic deosebit. Așa, de exemplu, splendida colorație roșie a monocristalelor de rubin este dată de impuritățile de Cr^{2+} în monocristalul de Al_2O_3 , care sînt atît impurități de substituție, cît și interstițiale. Impuritățile interstițiale oferă electronilor nivele energetice diferite de cele pe care le-ar avea în atomul de Cr liber și aceasta explică colorația roșie a rubinului. Unele dintre aceste nivele se utilizează, așa cum s-a menționat în § 10.4, în emițătoarele de radiație stimulată, de tip laser (în laserul cu rubin). De asemenea, cristalele de topaz prezintă colorația verde datorită prezenței ionilor de Ti^{2+} în monocristalul de Al_2O_3 .

b) Cele mai interesante defecte unidimensionale sînt *dislocațiile*, care pot fi liniare (sau de margine, fig. 11.2.25, a) și elicoidale (fig. 11.2.26, b). Pentru descrierea din punct de vedere fizic a dislocațiilor se utilizează *vectorul Burgers b* , care indică direcția, sensul și mărimea deplasării planelor reticulare vecine într-o dislocație (fig. 11.2.26). Desigur, vectorul Burgers poate fi egal sau mai mic decît vectorii de bază ai rețelei. Se observă că în dislocația liniară, un strat de noduri „alunecă”, în direcția vectorului Burgers, cu o valoare egală cu $|b|$ față de straturile vecine. Punctul P , în care începe o astfel de deplasare, se numește *nucleu al dislocației*, dislocația dezvoltîndu-se liniar, pe o direcție normală la b . În preajma acestor dislocații se va obține o anumită „dilatare” a solidului, ca urmare a deplasării reciproce a straturilor atomice vecine. De regulă, se depășește limita de elasticitate și de aceea, prin prezența dislocațiilor se pot explica o serie de proprietăți mecanice ale solidelor, legate de deformarea plastică sau de rezistența mecanică la oboseală a materialelor [66].

În dislocațiile elicoidale intervin deplasări ale microparticulelor vecine după o elice. Axa elicei străbate cristalul de la o față a sa la alta (fig. 11.2.26, b), dislocația dezvoltîndu-se în lungul vectorului Burgers b . Pot exista și cazuri în care dislocația se dezvoltă pe o direcție diferită de direcția lui b . Aceste dislocații sînt compuse din dislocații liniare și elicoidale. Apariția dislocațiilor, fiind însoțită de o creștere a energiei interne a solidului, va conduce la o scădere a rezistenței lui mecanice.

c) Defectele bi- și tridimensionale sînt de asemenea elemente de mare interes practic, studierea și influențarea lor fiind unul dintre scopu-

rile tuturor tehnicilor de îmbunătățire a structurilor cristaline. Există multiple tipuri de astfel de defecte [66, 82]. În figura 11.2.27 sînt reprezentate defectele cunosute sub denumirea de *macie*, în care creșterea diver-

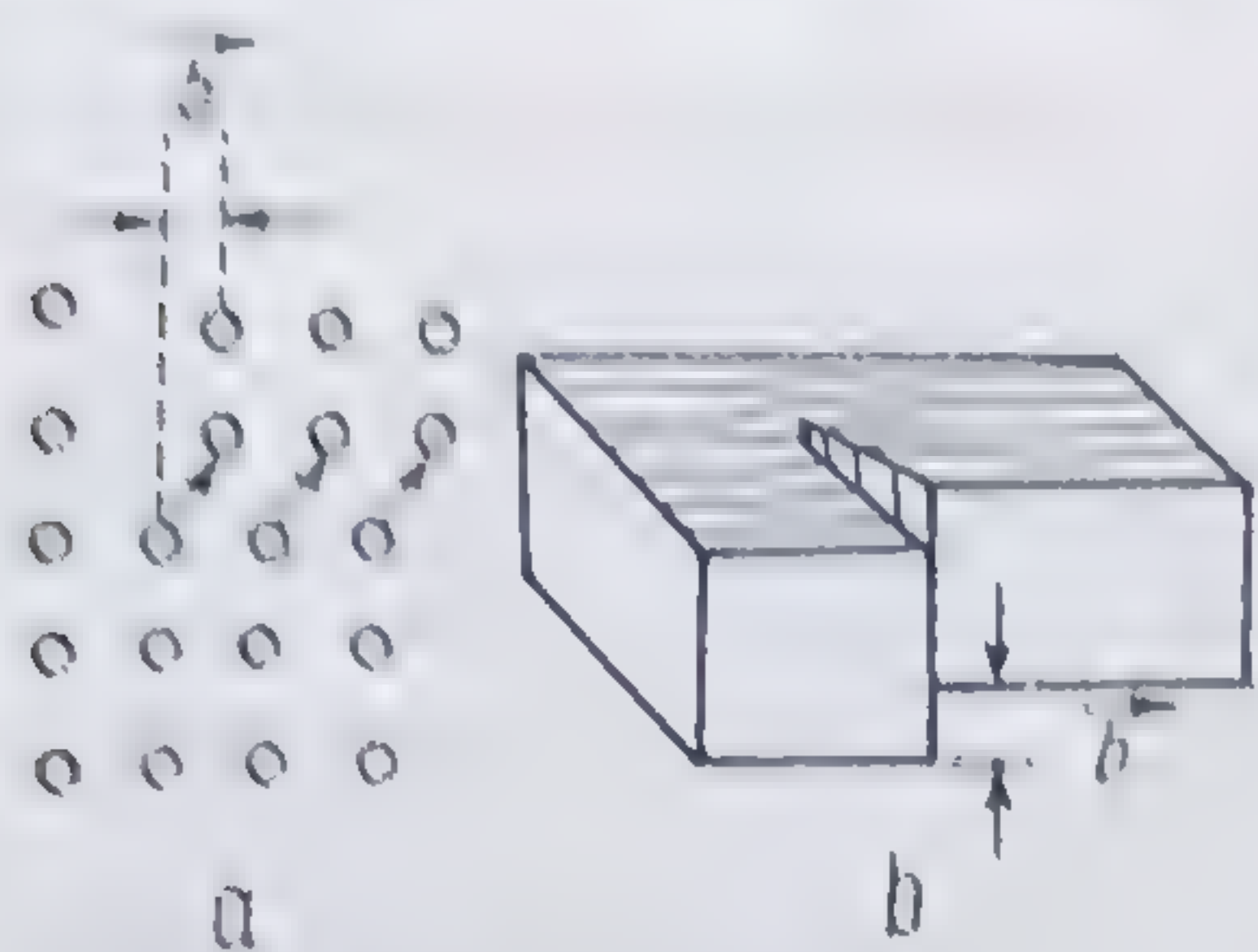


Fig. 11.2.26

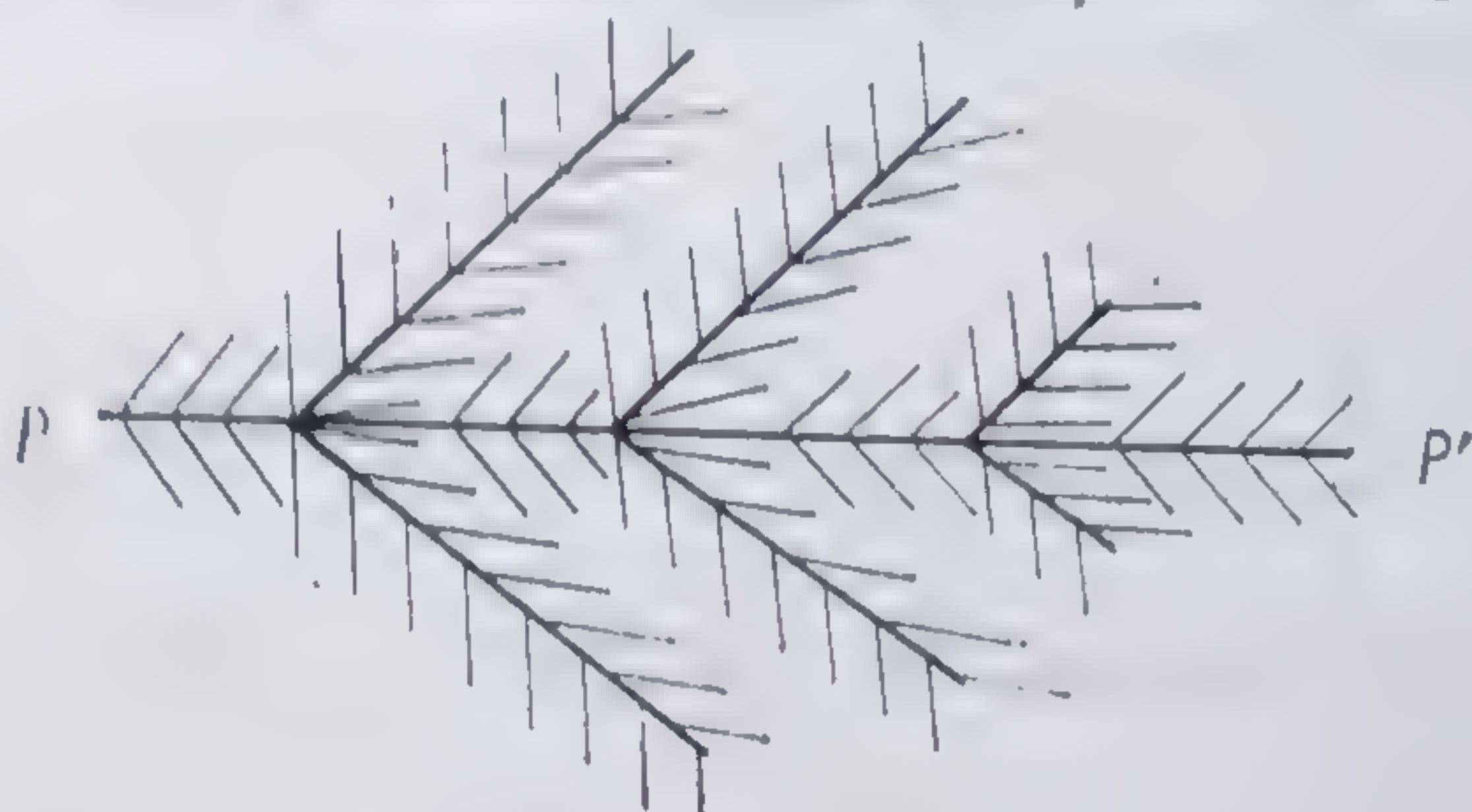


Fig. 11.2.27

selor faze se face simetrie față de un plan de oglindire (PP'). Din clasa defectelor bidimensionale și tridimensionale fac parte, așa cum s-a menționat, și pereții domenali, suprafețele libere ale corpului solid, incluziunile și ocluziunile volumetrice etc.

10.2.7. CLASE DE LEGĂTURI ÎN SOLID

Stabilitatea unei structuri cristaline este determinată de tipul și tăria forțelor de legătură dintre microparticulele ce constituie baza structurii respective. Aceste forțe, numite și *forțe de coeziune*, determină *energia de legătură* a solidului, respectiv energia necesară pentru a descompune solidul în părțile sale microscopice constitutive (în microparticulele bazei).

Se cunosc cinci tipuri distincte de legături în solid, de tări diferite, care determină respectivei structuri nu numai energii de legătură de valori diferite, ci și proprietăți fizice distincte. De aceea, există justificarea tratării proprietăților fizice ale solidului pe clase, de tipul celor trecute în tabelul 11.2.2.

Desigur că nu va exista o demarcație precisă între două astfel de clase vecine, natura oferind și structuri cristaline cu proprietăți ce se situează între aceste clase, în sensul că forțele lor de legătură sînt parțial ionice și parțial covalente, sau parțial covalente și parțial metalice ș.a.m.d. În realitate, forțele de legătură sînt determinate de forma și de distribuția spațială a orbitalilor electronici (atomici sau moleculari) ai bazei structurii cristaline. Studiul teoretic și experimental al acestor distribuții electronice constituie una dintre problemele fundamentale ale fizicii stării solide. Această problemă a putut fi abordată atât prin metode de calcul cuantice (vezi §11.3), cît și prin studii de difracție a radiațiilor X , a electronilor și neutronilor pe structuri cristaline, așa încît astăzi se cunosc principalele caracteristici ale acestor tipuri de bază ale forțelor de legătură din solid.

a) *Legătura ionică* : Se realizează prin transfer de electroni de valență, între atomi cu electronegativități mult diferite între ele. În urma acestui

rile tuturor tehnicilor de îmbunătățire a structurilor cristaline. Există multiple tipuri de astfel de defecte [66, 82]. În figura 11.2.27 sînt reprezentate defectele cunoscute sub denumirea de *macle*, în care creșterea diver-

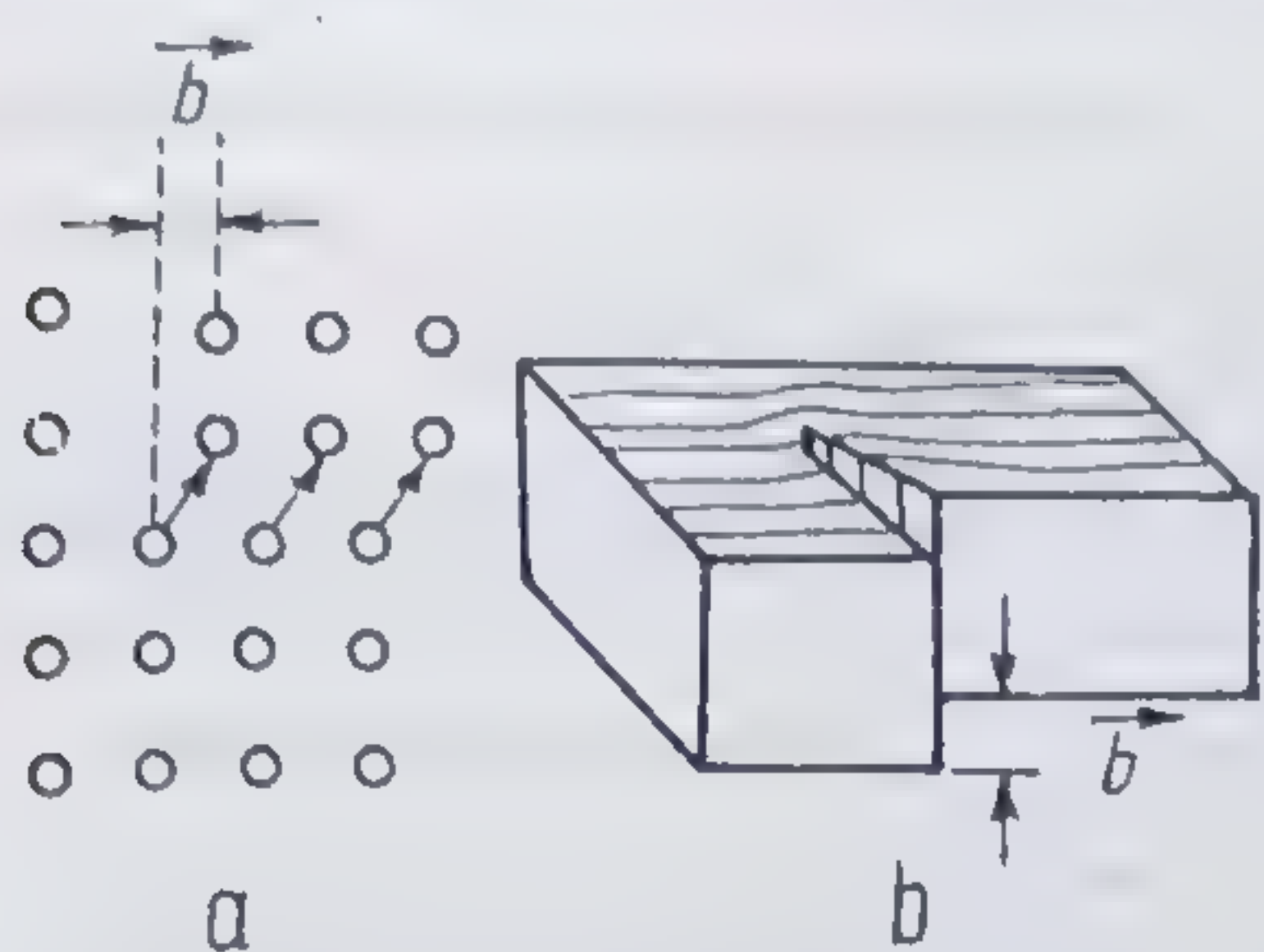


Fig. 11.2.26

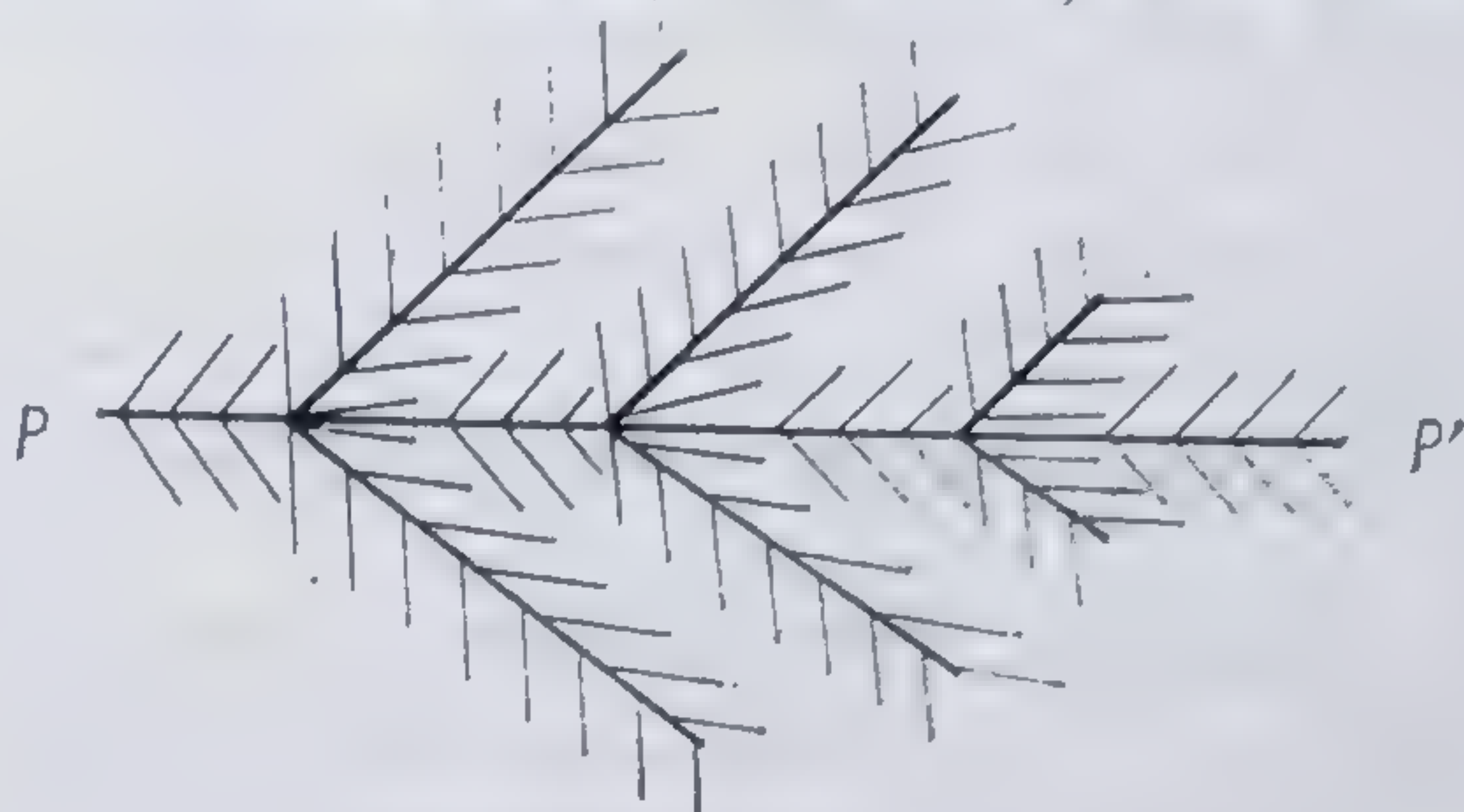


Fig. 11.2.27

selor faze se face simetric față de un plan de oglindire (PP'). Din clasa defectelor bidimensionale și tridimensionale fac parte, așa cum s-a menționat, și pereții domenali, suprafețele libere ale corpului solid, incluziunile și ocluziunile volumetrice etc.

10.2.7. CLASE DE LEGĂTURI ÎN SOLID

Stabilitatea unei structuri cristaline este determinată de tipul și tăria forțelor de legătură dintre microparticulele ce constituie baza structurii respective. Aceste forțe, numite și *forțe de coeziune*, determină *energia de legătură* a solidului, respectiv energia necesară pentru a descompune solidul în părțile sale microscopice constitutive (în microparticulele bazei).

Se cunosc cinci tipuri distincte de legături în solid, de tări diferite, care determină respectivelor structuri nu numai energii de legătură de valori diferite, ci și proprietăți fizice distincte. De aceea, există justificarea tratării proprietăților fizice ale solidului pe clase, de tipul celor trecute în tabelul 11.2.2.

Desigur că nu va exista o demarcație precisă între două astfel de clase vecine, natura oferind și structuri cristaline cu proprietăți ce se situează între aceste clase, în sensul că forțele lor de legătură sînt parțial ionice și parțial covalente, sau parțial covalente și parțial metalice ș.a.m.d. În realitate, forțele de legătură sînt determinate de forma și de distribuția spațială a orbitalilor electronici (atomici sau moleculari) ai bazei structurii cristaline. Studiul teoretic și experimental al acestor distribuții electronice constituie una dintre problemele fundamentale ale fizicii stării solide. Această problemă a putut fi abordată atît prin metode de calcul cuantice (vezi §11.3), cît și prin studii de difracție a radiațiilor X, a electronilor și neutronilor pe structuri cristaline, așa încît astăzi se cunosc principalele caracteristici ale acestor tipuri de bază ale forțelor de legătură din solid.

a) *Legătura ionică* : Se realizează prin transfer de electroni de valență, între atomi cu electronegativități mult diferite între ele. În urma acestui

Tabelul 11.2.2

Nr. crt.	Tipul legăturii	Tipul structurii cristaline	Energia de legătură kJ/kmol	Reprezentanți	Proprietăți fizice
1	ionică	cristale ionice	732 812	NaCl AgCl	Comportare dielectrică
2	covalentă	cristale covalente	209 ÷ 418	C; Si; Ge; SbAs	Comportare semiconductoră sau dielectrică
3	metalică	cristale metalice	109 ; 288 402	Na, Al, Fe	Comportare metalică
4	moleculară	cristale moleculare	4 ÷ 26,7	Ar, Kr, Xe	Comportare dielectrică densitate mică
5	punți de hidrogen	cristale cu legături de hidrogen	0 ÷ 4	H ₂ O (ghiață)	Duritate mică

transfer, atomii se transformă în ioni sferici (avînd la periferie orbitali de tip S), încărcăți cu sarcini electrice de semne contrare. Între acești ioni se vor naște forțe de atracție, de tip coulombian.

Legătura ionică este specifică halogenurilor alcaline (NaCl; AgCl; LiF etc.). De exemplu, în cazul cristalului de LiF, structura electronică a atomilor liberi de Li ($1s^2 2s^1$) și F ($1s^2, 2s^2 2p^5$) se modifică, prin trecerea electronului $2s^1$ de la Li pe orbitalul $2p$ al fluorului. În urma acestui transfer se obțin ioni pozitivi de Li^+ ($1s^2$) și negativi de Cl^- ($1s^2 2s^2 2p^6$), ambii posedînd orbitali complet populați, deci de formă sferică (fig.11.2.28).

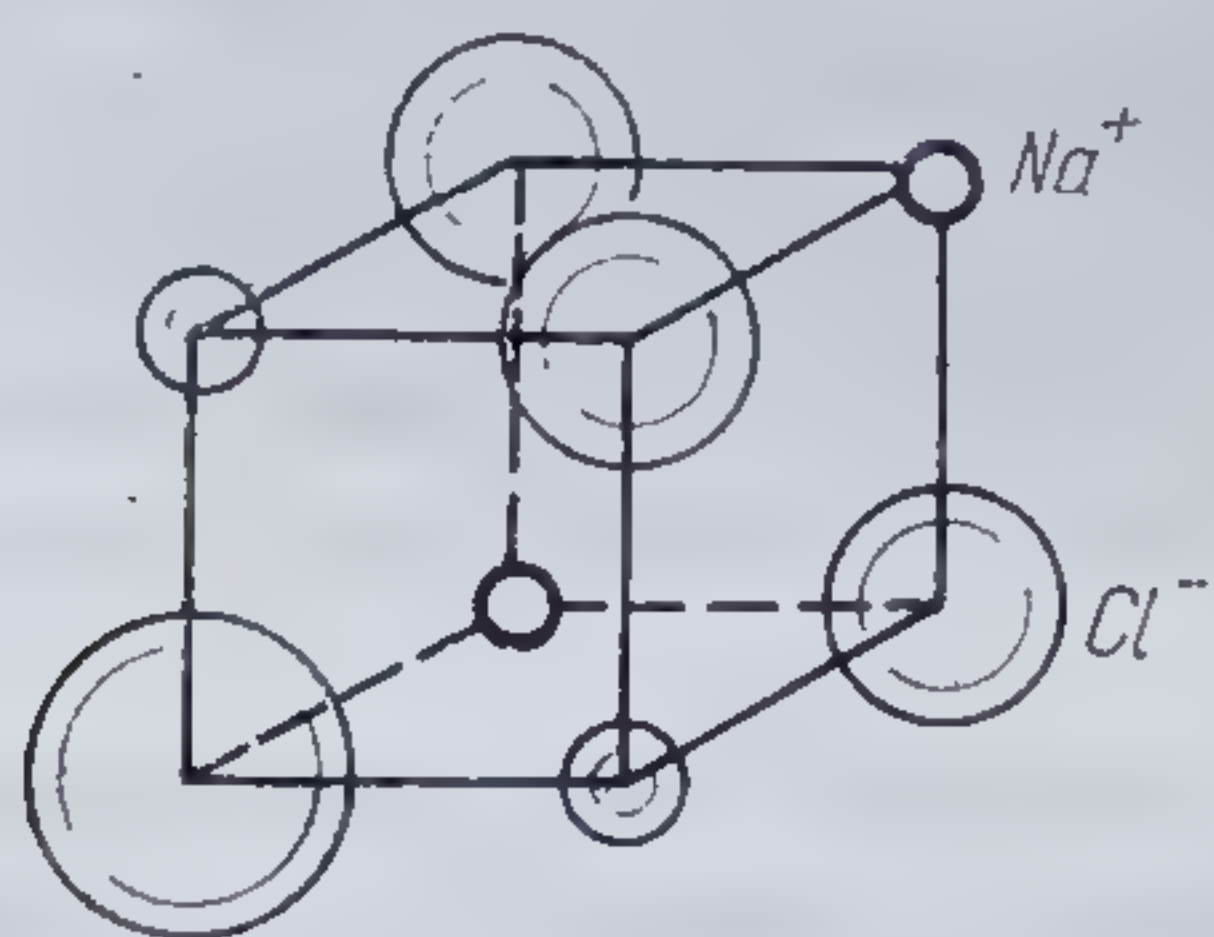


Fig. 11.2.28

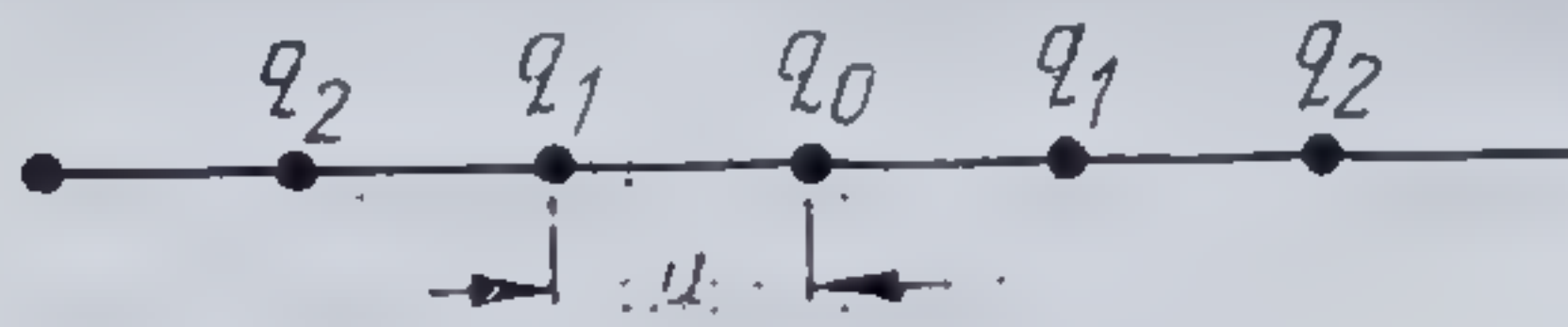


Fig. 11.2.29

Avînd în vedere că forțele ce apar între acești ioni sînt forțe coulombiene, cu rază lungă de acțiune, se poate calcula efectiv energia de legătură E_{leg} , pentru diverse tipuri de structuri cristaline. Vom exemplifica acest calcul pe cazul simplu al unei rețele unidimensionale, de constantă a (fig. 11.2.29), formată din ioni de sarcină q . Energia de interacție dintre doi vecini va fi dată de

$$V_{coul.} = \frac{q_1 q_2}{4\pi \epsilon_0 r} \quad (11.2.66)$$

astfel încât pentru întregul șir reticular, se va obține

$$E_{leg} = 2 \left(\frac{q_0 q_1}{4\pi \epsilon_0 a} + \frac{q_0 q_2}{4\pi \epsilon_0 (2a)} + \dots + \frac{q_0 q_n}{4\pi \epsilon_0 (na)} \right)$$

sau, întrucât $q_0 = q_2 = q_n \dots = +q$; și $q_1 = q_3 = \dots q_{2n} = -q$,

$$E_{leg} = -2 \frac{q^2}{4\pi \epsilon_0 a} \cdot \left(1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \dots \right). \quad (11.2.67)$$

Se constată că seria alternantă din paranteză este convergentă și are suma

$$\alpha = 1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \dots = \ln 2 \quad (11.2.68)$$

deci

$$E_{leg} = - \frac{q^2}{2\pi \epsilon_0 a} \alpha. \quad (11.2.69)$$

De consemnat că constanta α , numită și *constantă Madelung*, poate fi calculată pentru orice tip de structură cristalină tridimensională. Ea are, de exemplu, pentru structura cubică a clorurii de sodiu (NaCl), valoarea $\alpha = 1,74756$. Rezultă din cele expuse mai sus că dacă se cunosc sarcina q a ionilor, care formează baza structurii și constantele (a_1, a_2, a_3) ale rețelei cristaline, atunci se poate obține prin calcul valoarea energiei de legătură E_{leg} , valoare care concordă destul de bine cu datele experimentale.

b) *Legătura covalentă*: se realizează prin perechi de electroni (respectiv prin suprapuneri de orbitali atomici de tip p), care devin comuni celor doi parteneri vecini între care se realizează respectiva legătură. Acest tip de legătură este specifică elementelor tetravalente (C, Si, Ge, Sn) în stare solidă, întâlnindu-se frecvent și la substanțe organice. De exemplu, în cazul metanului (CH_4), electronii $1s$ ai hidrogenului H se cuplează cu electronii $2p$ ai carbonului, completând în felul acesta popularea orbitalului polar $2p$ al carbonului, la 6 electroni.

De menționat că dacă în cazul diamantului (monocristalul cubic de C) și a cristalelor de siliciu și germaniu se întâlnesc legături covalente tipice, la alte structuri cristaline intervin legături numai parțial covalente, întrucât peste aceste legături se suprapun legături de tip ionic. Proporția în care participă cele două tipuri de legături se exprimă prin noțiunea de *electronegativitate*. Electronegativitatea exprimă capacitatea unui atom de a atrage spre el electroni. Ea este maximă pentru elementele halogene și scade treptat spre elementele din grupa I-a (alcaline). De aceea, cu cât orbitalii atomici sînt mai apropiați, cu atît electronegativitatea va fi mai slabă și invers. Aceasta explică de ce elementele din grupa I-a și a VII-a realizează legături pur ionice, cele din grupa a IV-a, legături pur covalente, iar în restul cazurilor intervin concomitent, în proporții diferite, ambele tipuri de legături.

c) *Legătura metalică*: este o legătură colectivă, în sensul că o structură de ioni pozitivi (ionii metalici), așezați în nodurile rețelei cristaline interacționează cu un fluid electronic (format în principal din electronii de valență).

ai metalului, care „scaldă” structura ionică). Fluidul electronic nu numai că anulează repulsia coulombiană dintre ionii pozitivi, dar și creează un surplus de forță atractivă care este tocmai forța de legătură metalică.

De consemnat că în studiul acestor forțe, respectiv al energiei de legătură a metalelor, nu se mai pot individualiza partenerii de interacțiune ion-electron, electronii aparținând întregului ansamblu de ioni pozitivi. De asemenea, nu poate fi precizată ușor nici natura forțelor de legătură metalică. Experiența arată că energia de legătură a metalelor depinde de prezența spinilor, întrucât energia de legătură la metalele de tranziție este mai mare decât la metalele netranziționale, așa cum se vede din tabelul 11.2.2.

Caracteristicile menționate ale legăturilor metalice au condus la elaborarea câtorva metode de calcul al energiei de legătură a metalelor. Una dintre aceste metode se bazează pe ideia *cîmpului self-consistent*, menționată în § 10.7, care a condus la ecuația Hartree (10.7.25). Dacă în această ecuație se adaugă și interacția de schimb dintre electronii liberi ai metalului se obține *ecuația Hartree-Fock*, care are forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \sum_{n=1}^N V_n(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_j \int \frac{|\psi_i(\mathbf{r}_j)|^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} d\nu_j - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{\psi_j^*(\mathbf{r}_j) \psi_i(\mathbf{r}_j) \psi_j(\mathbf{r}_j)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \psi_i(\mathbf{r}_i)} \right] \right] \psi_i(\mathbf{r}_i) = E \psi_i(\mathbf{r}_i) \quad (11.2.70)$$

Ultimul termen din membrul întâi exprimă o astfel de interacție de schimb dintre spinii electronici situați în punctele \mathbf{r}_i , respectiv \mathbf{r}_j , iar $V_n(\mathbf{r})$, este energia unui electron în cîmpul coulombian al ionului n , existînd N astfel de ioni în structura metalică. Prin rezolvarea ecuației (11.2.70) (a alegînd de exemplu o funcție de undă de tip Bloch (8.8.64)) se poate evalua energia de legătură a structurii metalice. Dar o astfel de problemă nu este de loc ușoară [35, 40] și de regulă rezolvarea ei se face prin metode aproximative, cum sînt *metoda Thomas — Fermi* [57] sau *metoda Wigner-Seitz* [52].

d) *Legătura moleculară* se realizează între atomi sau molecule, neutre din punct de vedere electric, care în fază condensată interacționează prin *forțe de tip Van der Waals*. Se știe că aceste forțe sînt de tip dipolar electric și că ele apar datorită fluctuațiilor care, la nivel atomic sau molecular, induc dipoli electrici fluctuanți.

Pentru a estima intensitatea acestor forțe, vom admite că \mathbf{p} este momentul dipolar-electric ce apare pe unul dintre atomii structurii. Atunci, acest moment dipolar va crea, la distanța \mathbf{r} de el, un cîmp electric \mathbf{E}_1 , dat de expresia (6.6.44), care pentru $\mathbf{r} \parallel \mathbf{p}$, se va reduce la forma

$$\mathbf{E}_1 = \frac{2\mathbf{p}_1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r^3} \quad (11.2.71)$$

În cîmpul electric \mathbf{E}_1 se va induce, într-un alt atom vecin al structurii, un moment dipolar, \mathbf{p}_2 , dat de expresia

$$\mathbf{p}_2 = \alpha \mathbf{E}_1 = \frac{2\alpha\mathbf{p}_1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r^3} \quad (11.2.72)$$

Energia de interacție dintre acești doi dipoli va fi deci

$$V(r) = -p_2 E_1 = -\frac{\alpha p_1^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r^6} \quad (11.2.73)$$

ceea ce înseamnă că forțele de interacțiune variază rapid cu distanța r , fiind de forma.

$$|F| = -\frac{\partial V(r)}{\partial r} = -\frac{6\alpha p^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r^7}. \quad (11.2.74)$$

De aceea, forțele Van der Waals își exercită acțiunea numai asupra primilor vecini (cei de coordinație unu, care fac parte din sfera coeziunii moleculare a respectivului atom). Aceste forțe sînt tipice pentru faza lichidă.

e) *Legătura prin punți de hidrogen*. În cadrul unor astfel de legături atomul de H se leagă cu protonul de un partener, iar cu electronul de alt partener, realizînd între ei adevărate punți de legătură. Legătura de hidrogen este specifică pentru gheață, dar se întîlnește și la multe substanțe organice, jucînd un rol esențial în procesele de polimerizare.

§ 11.3. STAREA ELECTRONILOR ÎN STRUCTURI CRISTALINE

11.3.1. BENZI DE ENERGIE

Și în cazul stării solide, ca și în cel al atomilor și moleculelor libere, proprietățile fizice sînt determinate, aproape în totalitate, de starea cuantică a electronilor din respectivele structuri cristaline, deoarece se constată că contribuția nucleelor și a proceselor nucleare la determinarea acestor proprietăți este cu totul neînsemnată, putînd fi neglijată într-o primă aproximație.

Starea electronilor dintr-o structură cristalină prezintă o serie de particularități față de cea a electronilor din atomi sau din molecule libere. Aceste particularități vor trebui să se reflecte, într-un fel, în însăși funcția de undă ψ , care descrie o astfel de stare cuantică; ele pot fi evidențiate ușor, dacă se urmărește procesul de formare al unei structuri cristaline.

Să ne imaginăm că o astfel de structură ia naștere prin apropierea treptată a mai multor atomi între ei, pînă la distanțe reciproce x , egale cu constantele cristaline a_i ($i = 1, 2, 3$). Atunci, în cazul unei rețele unidimensionale (fig. 11.3.1, a), dacă $x \gg a$, stările electronilor vor fi cele atomice, însă situația se va schimba deîndată ce x se apropie, ca valoare, de a (a — fiind constanta rețelei) și tocmai această schimbare în structura și forma orbitalilor atomici determină atît stabilitatea respectivei structuri cristaline, cît și noile proprietăți ale acesteia, distincte de ale atomilor din care este formată.

În primul rînd se constată o schimbare a formei barierelor coulombiene de potențial $V(x)$ (care leagă electronii de nuclee), acestea devenind

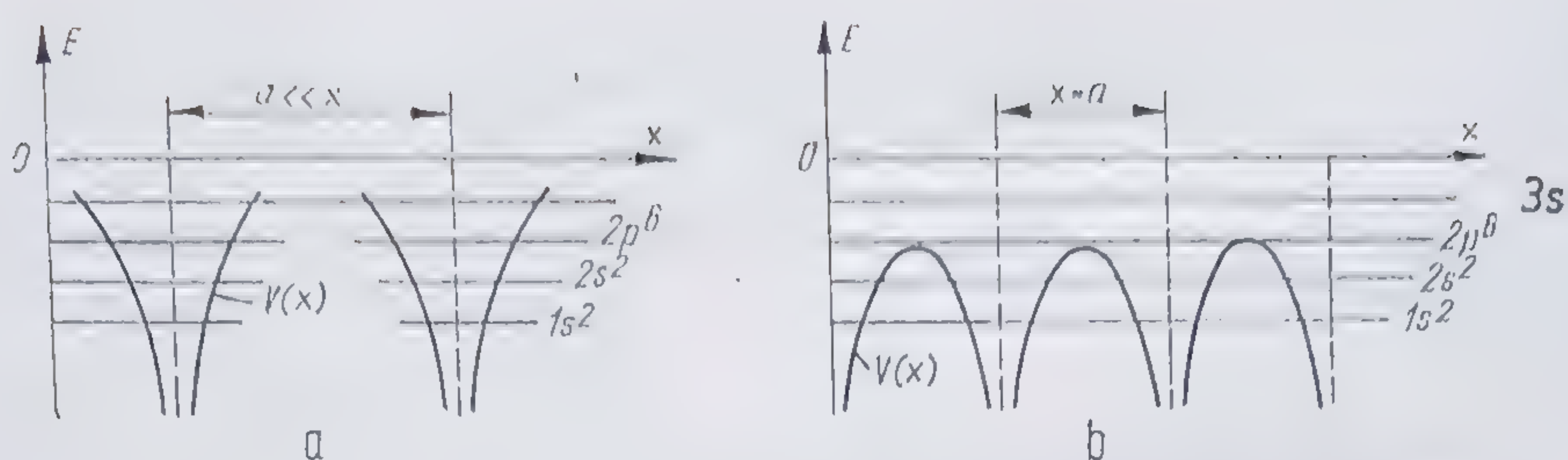


Fig. 11.3.1

de „înălțime” finită, în așa fel încât în cazul schițat în fig. 11.3.1. b, de exemplu, electronii $3s^2$ nu mai simt prezența acestor bariere, devenind practic liberi. Ei se vor putea deplasa în orice punct al rețelei cristaline. În schimb, pentru ceilalți electroni $1s^2$, $2s^2$ și parțial chiar și pentru electronii $2p^6$, structura cristalină va prezenta o succesiune periodică de bariere de potențial, pe care aceștia le vor putea trece numai prin escaladare sau prin efect tunel.

În al doilea rând, intervin aspecte noi, determinate de specificitatea comportării cuantice a electronilor. Unul dintre aceste aspecte este legat de faptul că reunirea a N electroni într-o structură cristalină nu înseamnă că se vor obține sisteme cu $2N$ electroni în starea $1s$, $2N$ electroni în starea $2s$, $6N$ în starea $2p$, Ng_i în starea E_i , degenerată de g_i ori, deoarece formarea unor astfel de sisteme electronice nu este compatibilă cu principiul de excluziune a lui Pauli. Deci, sisteme de acest fel nu se pot realiza efectiv. Structura cristalină ia totuși naștere datorită faptului că interacțiunea dintre electronii celor N atomi din structură determină o ridicare parțială a degenerării de ordin Ng_i a fiecărui nivel energetic atomic, respectiv această interacțiune determină o despicare a fiecărui nivel energetic atomic E_i în N subnivele foarte apropiate între ele (fig. 11.3.2), care formează *benzi permise de energie*. Electronii vor putea trece ușor de pe un subnivel pe altul, în cadrul grupului de subnivele ce provin de la același nivel atomic ($1s$; $2s$; $2p$; ...) și care formează o bandă permisă de energie (vor exista benzile permise $1s$, $2s$, $2p$, ... ș.a.m.d.), dar vor avea nevoie de o

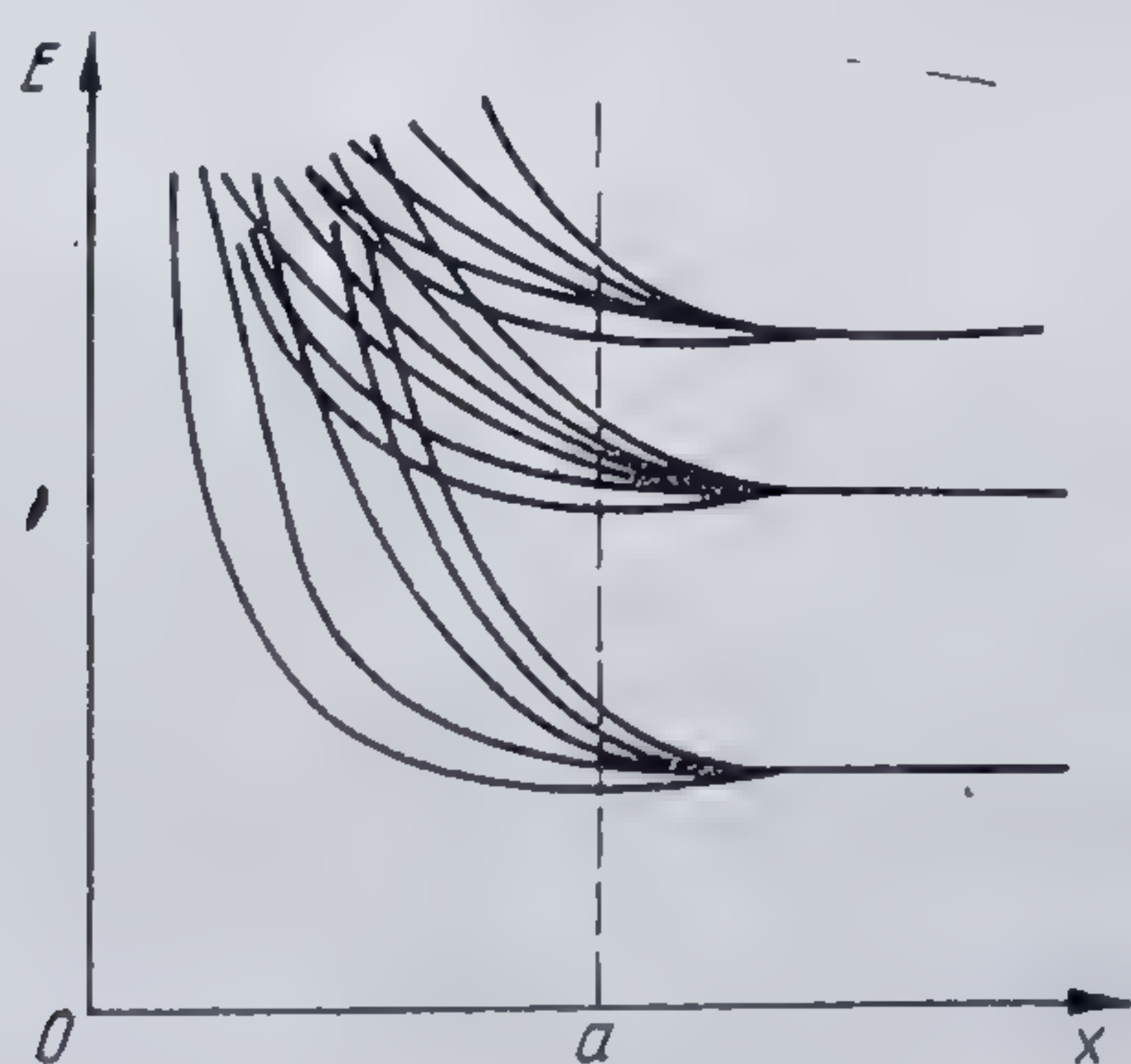


Fig. 11.3.2

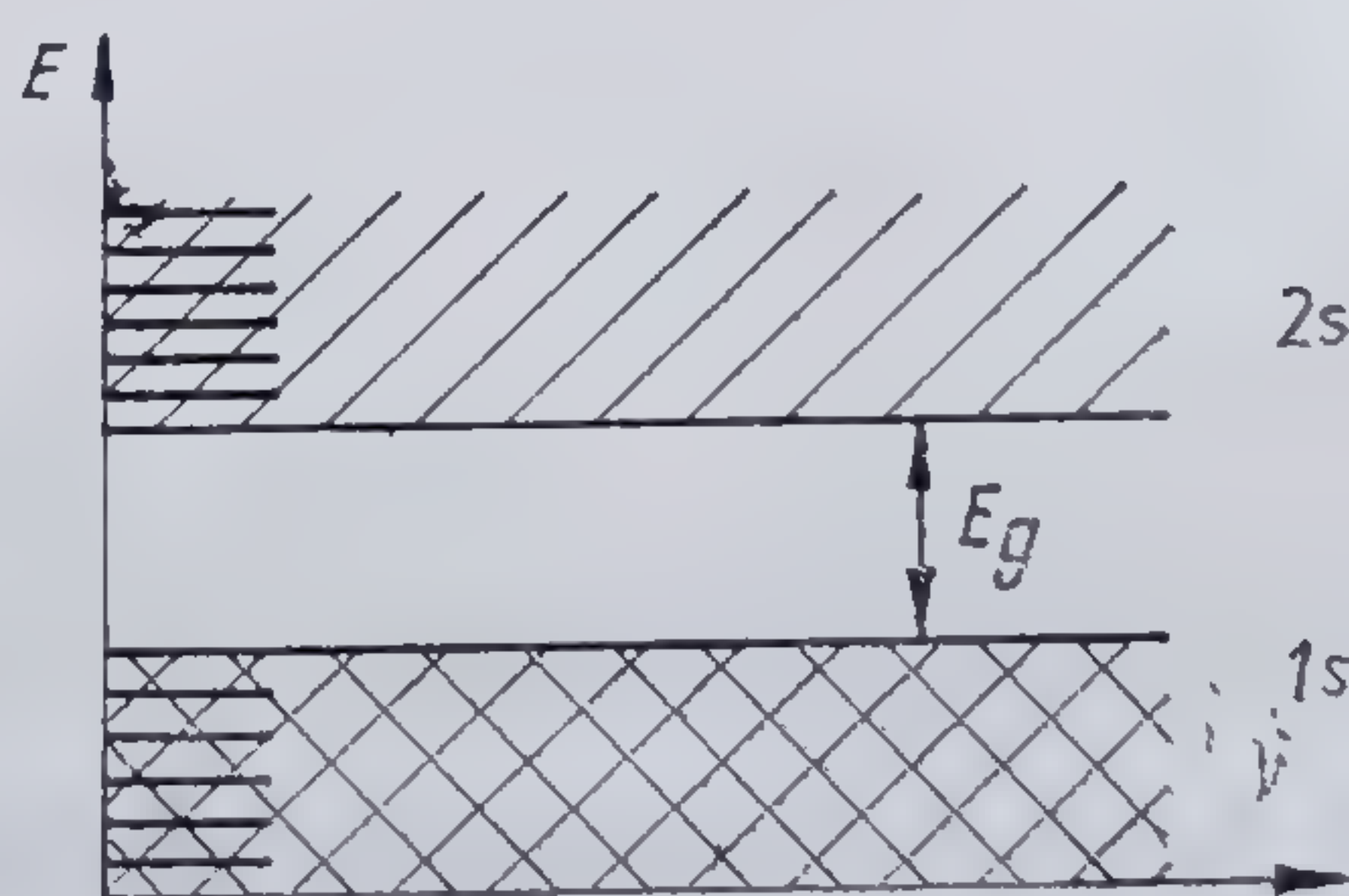


Fig. 11.3.3

arumită energie pentru a trece dintr-o bandă permisă în altă bandă permisă vecină, separată de prima printr-o așa numită *bandă de energie interzisă* (fig. 11.3.3).

Existența benzilor interzise de energie în distribuția stărilor energetice ale electronilor dintr-o structură cristalină este un fapt cu totul remarcabil și el a fost atestat de experiențele de difracție ale radiațiilor X, respectiv ale electronilor și neutronilor pe monocristale. Se știe că aceste experimente pun în evidență reflexii ale fotonilor de radiație X sau ale electronilor pe structuri cristaline, de fiecare dată când este satisfăcută condiția Bragg (11.2.54). Prin urmare, electronii, respectiv fotonii de radiație X, ale căror numere de undă satisfac condiția

$$k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n} = \frac{n\pi}{d_{(hkl)} \sin \theta_n}; \quad n = \pm 1, \pm 2, \dots \quad (11.3.1)$$

nu vor fi absorbiți de către solid din cauză că structura lui de benzi energetice nu posedă stări energetice permise, corespunzătoare valorilor $k = k_n$.

Dacă $\theta_n = \frac{\pi}{2}$, atunci rezultă că pentru toate valorile lui k , date de expresia

$$k = k_n = \frac{n\pi}{d_{(hkl)}}; \quad n = \pm 1, \pm 2, \dots \quad (11.3.2)$$

în distribuția din spațiul (k) a stărilor energetice electronice din solid, își au începutul sau sfârșitul benzile interzise de energie.

Rezultă, din considerentele prezentate mai sus, că una dintre problemele de maximă importanță pentru studiul solidului o reprezintă stabilirea dependenței de vectorul de undă k a energiei $E = E(k)$ a electronilor și evidențierea, în această dependență, a punctelor $k = k_n$, pentru care se produc reflexii Bragg. Teoretic, o astfel de problemă poate fi abordată și rezolvată cu metodele mecanicii cuantice. În acest scop, se caută funcțiile de undă $\psi_k(\mathbf{r})$, care descriu starea cuantică a electronilor din solid. Dacă se cunoaște hamiltonianul de interacțiune \hat{H} a electronilor din respectivul sistem cuantic, atunci

$$E(k) = \int \psi_k^* \hat{H} \psi_k dV \quad (11.3.3)$$

Dar, găsirea funcțiilor de undă $\psi_k(\mathbf{r})$ presupune rezolvarea, pentru o structură cristalină ideală și staționară în timp, a unei ecuații de undă de forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (11.3.4)$$

în care energia potențială $V(\mathbf{r})$ trebuie să încorporeze toate interacțiunile electronului cu ceilalți electroni și cu nodurile ionice ale structurii. De aceea, stabilirea unei expresii concrete pentru $V(\mathbf{r})$ presupune rezolvarea unei „probleme a mai multor corpuri”, problemă inabordabilă cu mijloacele analitice de care dispunem astăzi. În consecință, se va putea obține cel

mult o rezolvare aproximativă a ecuației (11.3.4). Există mai multe metode de rezolvare aproximativă a acestei probleme. Una dintre ele, care presupune că nodurile ionice, respectiv nucleele atomice din aceste noduri sînt fixe, iar distribuția cîmpului electric cristalin are o simetrie identică cu simetria respectivei structuri cristaline (*aproximație adiabatică*; vezi §10.7).

În cadrul aproximației adiabatice, atît $V(\mathbf{r})$ cît și $\psi(\mathbf{r})$ trebuie să posede simetria structurii cristaline, adică trebuie să rămînă invariante față de toate operațiile de simetrie ale grupurilor de simetrie specifice respectivei structuri. Una dintre aceste operații este translația care, așa cum s-a arătat în § 11.2.1, se poate exprima prin vectorul \mathbf{R}_n , dat de expresia (11.2.2). Operația de translație va trebui deci să lase invariante funcțiile $V(\mathbf{r})$ și $\psi(\mathbf{r})$, adică va trebui să avem

$$V(\mathbf{r}) \equiv V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n); \psi(\mathbf{r}) \equiv \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) \quad (11.3.5)$$

Pentru a găsi forma explicită a funcției de undă $\psi(\mathbf{r})$, care să satisfacă condiției de mai sus, vom introduce un *operator de translație* \hat{T}_n , definit în așa fel încît să fie satisfăcută egalitatea

$$\hat{T}_n \psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) \quad (11.3.6)$$

De altă parte însă

$$\hat{T}_n \psi(\mathbf{r}) = \langle T_n \rangle \psi(\mathbf{r}) \quad (11.3.7)$$

$\langle T_n \rangle$ fiind valoarea proprie a operatorului \hat{T}_n . Din aceste ultime două ecuații rezultă

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = \langle T_n \rangle \psi(\mathbf{r}) \quad (11.3.8)$$

Dar, întrucît atît $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n)$, cît și $\psi(\mathbf{r})$ satisfac condiții de normare, de forma

$$\int |\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n)|^2 d\mathcal{V} = \int |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathcal{V} = 1 \quad (11.3.9)$$

rezultă că $|\langle T_n \rangle|^2 = 1$. Se observă atunci că $\langle T_n \rangle$ va putea avea numai valorile

$$\langle T_n \rangle = e^{ik\mathbf{R}_n} \quad (11.3.10)$$

în care \mathbf{k} este un vector de undă real, deoarece în acest caz $|\langle T \rangle|^2 = \langle T_n \rangle^* \langle T_n \rangle = \exp(ik\mathbf{R}_n) \exp(-ik\mathbf{R}_n) = 1$. Înlocuind expresia (11.3.10) în (11.3.7) și ținînd cont de (11.3.6), obținem:

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = e^{ik\mathbf{R}_n} \psi_k(\mathbf{r}). \quad (11.3.11)$$

Acastă egalitate exprimă aceeași condiție de invarianță a funcției de undă $\psi(\mathbf{r})$ față de operația de translație ca și a doua egalitate (11.3.5). Dar expresia (11.3.11) conține în plus vectorul de undă \mathbf{k} , specific atît valorilor proprii ale operatorului de translație \hat{T}_n , cît și funcțiilor sale proprii $\psi_k(\mathbf{r})$.

Valorile permise ale lui \mathbf{k} se obțin din anumite condiții la limită care, așa cum au arătat Born și Kármán, pot fi *condiții de ciclicitate* și anume, dacă cristalul conține N_1, N_2, N_3 noduri pe axele sale cristaline, atunci se impun condiții de invarianță de forma

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + N_i \mathbf{a}_i) \quad (11.3.12)$$

din care cu (11.3.11) rezultă

$$\exp \cdot (ik_1 a_1 N_1) = \exp(ik_2 a_2 N_2) = \exp(ik_3 a_3 N_3) = 1 \quad (11.3.13)$$

respectiv cu (11.2.43)

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 = \frac{m_1}{N_1} \mathbf{b}_1 + \frac{m_2}{N_2} \mathbf{b}_2 + \frac{m_3}{N_3} \mathbf{b}_3. \quad (11.3.14)$$

Aici, $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ sînt vectorii elementari ai rețelei inverse, iar m_1, m_2, m_3 parcurg șirul numerelor naturale.

Considerații similare, cu privire la proprietățile de simetrie față de translație, se pot face și referitor la funcția potențială, $V(\mathbf{r})$; astfel, se poate lua

$$\hat{T}_n(V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n). \quad (11.3.15)$$

Dar în aceste condiții, operatorul \hat{T}_n comută cu operatorul hamiltonian $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + V(\mathbf{r})$, adică $[\hat{H}, \hat{T}_n]_- = 0$, ceea ce înseamnă că funcția de undă $\psi_k(\mathbf{r})$, dată de expresia (11.3.11), va fi în același timp funcție proprie atât pentru operatorul \hat{T}_n , cât și pentru operatorul \hat{H} . În acest caz, orice combinație de forma

$$\psi_k(\mathbf{r}) = u_k(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (11.3.16)$$

în care amplitudinea $u_k(\mathbf{r})$ satisface o condiție de periodicitate de forma

$$u_k(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = u_k(\mathbf{r}) \quad (11.3.17)$$

va fi o funcție de undă proprie pentru ambii operatori \hat{T}_n și \hat{H} , în conformitate cu principiul de superpoziție, cu condiția ca amplitudinea $u_k(\mathbf{r})$ să fie soluție a ecuației de stări proprii a lui \hat{H} . Într-adevăr, cu (11.3.16) și (11.3.17), din (11.3.11) se obține

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} u_k(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = u_k(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R}_n)}$$

O funcție de undă de forma (11.3.16), în care unda progresivă $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ este modulată periodic în amplitudinea $u_k(\mathbf{r})$, cu periodicitatea rețelei cristaline, poartă numele de *funcție de undă de tip Bloch*. În figura 11.3.4

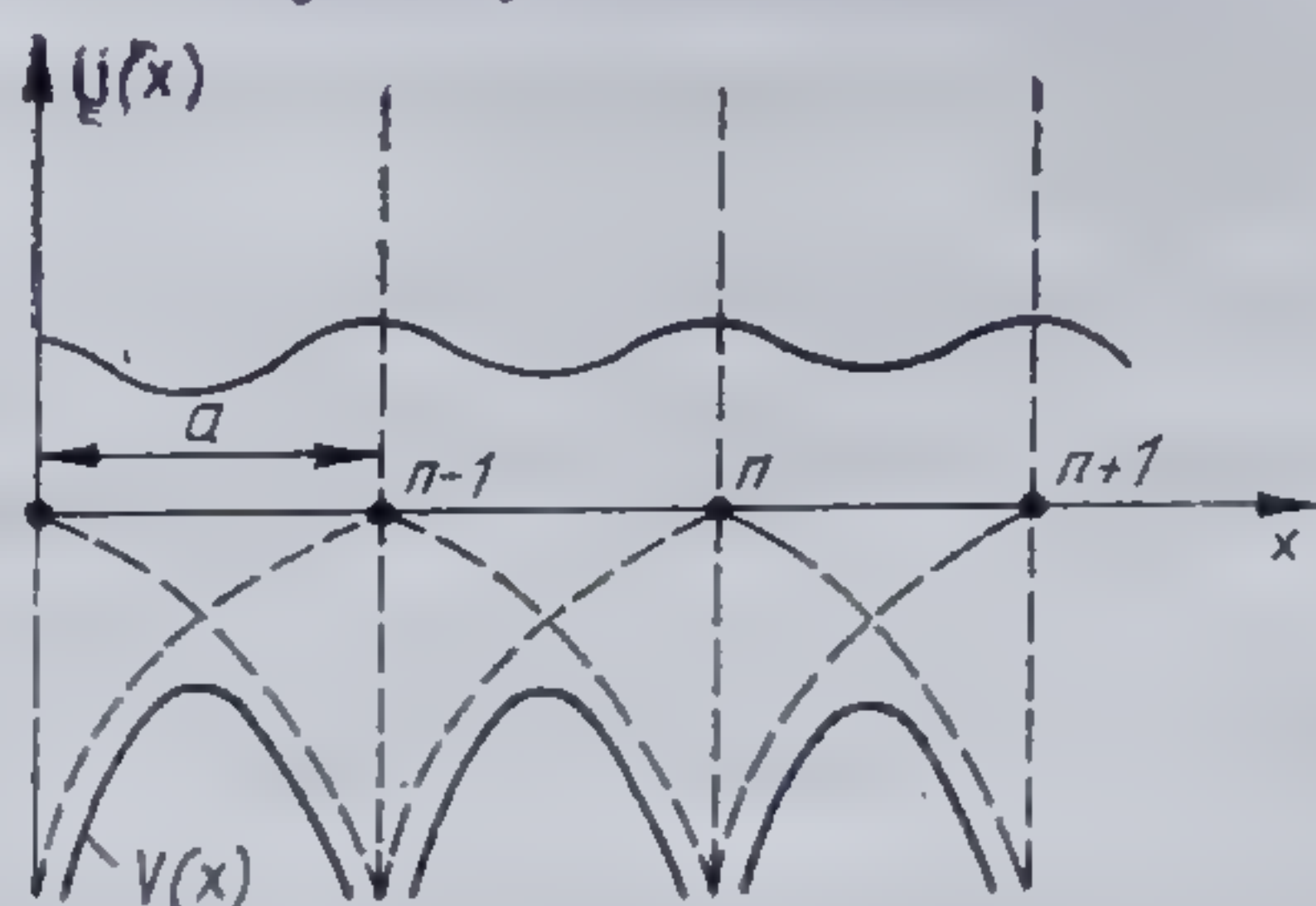


Fig. 11.3.4

este reprezentată grafic o astfel de funcție pentru o rețea unidimensională. Se evidențiază modularea periodică a amplitudinii $u_k(x - x_n)$, cu periodicitatea rețelei „ a ”. (curba de sus).

Calcularea energiei $E = E(\mathbf{k})$ pentru electronii descriși prin funcții de undă de tip Bloch, presupune rezolvarea ecuației lui Schrödinger (11.3.4). Dacă în această ecuație se înlocuiește $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ cu expresia (11.3.16), rezultă :

$$\Delta u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + 2i\mathbf{k} \cdot \nabla u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left[E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} - V(\mathbf{r}) \right] u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0. \quad (11.3.18)$$

Desigur că în acest caz, stările staționare ale electronilor din solid vor fi descrise de funcțiile proprii $u_{\mathbf{k}_n}(\mathbf{r})$, adică de acele funcții $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ care satisfac condiții la limită de tip Born-Kármán. Aceste funcții determină în același timp și valorile proprii $E_n(\mathbf{k})$ ale operatorului \hat{H} .

Aflarea soluțiilor ecuației (11.3.18), pentru o funcție potențială $V(\mathbf{r})$, care satisface condiții de simetrie de forma (11.3.5), este însă o problemă dificilă, care poate fi rezolvată numai în diverse aproximații [116]. Una dintre aceste aproximații este cunoscută sub numele de *aproximația legăturii strânse sau metoda LCAO* (Linear Combination of Atomic Orbitals). Pentru a expune această metodă, să observăm mai întâi că dacă în ecuația (11.3.4), $V(\mathbf{r}) = 0$, atunci electronul din respectiva structură cristalină se va comporta ca un electron liber, starea lui cuantică fiind descrisă de o funcție de undă de forma (8.8.4), respectiv de

$$\psi_{\mathbf{k}}^0(\mathbf{r}) = \psi_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (11.3.19)$$

Se observă de asemenea că amplitudinea, $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi_0$, a acestei funcții de undă este constantă, energia electronului fiind dată de expresia

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}. \quad (11.3.20)$$

În schimb, pentru $V(\mathbf{r}) \neq 0$, dar în aproximația $k \rightarrow 0$, ecuația (11.3.18) se reduce la forma

$$\Delta u_0 + \frac{2m_e}{\hbar^2} [E_0 - V(\mathbf{r})] u_0 = 0. \quad (11.3.21)$$

De remarcat că soluțiile $u_0(\mathbf{r})$ ale acestei ecuații trebuie să posede aceeași simetrie ca și funcția potențială $V(\mathbf{r})$, respectiv simetria rețelei cristaline, cu toate că prin E_0 s-a notat energia unui electron din atomul liber. Acest fapt ne sugerează să luăm pentru $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ și respectiv pentru $V(\mathbf{r})$ combinații liniare de forma

$$\psi_{\mathbf{k}_n}(\mathbf{r}) = \sum_n e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_n} u_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n); \quad V(\mathbf{r}) = \sum_n V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \quad (11.3.22)$$

în care $u_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ sînt funcții de undă atomice, care satisfac condiții de ortonormare de forma

$$\int u_0^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) u_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) d\mathcal{V} = \delta_{mn}. \quad (11.3.23)$$

Pentru o structură cu N noduri și funcții de undă de tipul (11.3.22), se obține

$$\int \psi_{\mathbf{k}_m}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}_n}(\mathbf{r}) d\mathcal{V} = \sum_m \sum_n e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)} \delta_{mn} = N. \quad (11.3.24)$$

astfel încît expresia normată a funcției $\psi_{k_n}(\mathbf{r})$, va avea forma :

$$\psi_{k_n}(\mathbf{r}) = N^{-1/2} \sum_n e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_n} u_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \quad (11.3.25)$$

\mathbf{R}_n fiind un vector al rețelei cristaline. Atunci, cu

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + V(\mathbf{r}) \quad (11.3.26)$$

se va putea scrie :

$$\begin{aligned} \hat{H} \psi_{k_n}(\mathbf{r}) &= N^{-1/2} \sum_n e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_n} \hat{H} u_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) = N^{-1/2} \sum_n e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_n} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + \right. \\ &+ \left. V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \right] u_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) + N^{-1/2} \sum_n e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_n} [V(\mathbf{r}) - V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)] u_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) = \\ &= E_0 \psi_{k_n}(\mathbf{r}) + N^{-1/2} \sum_n e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_n} [V(\mathbf{r}) - V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)] u_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \end{aligned}$$

Pentru energia $E(\mathbf{k})$, a electronului, rezultă expresia

$$E(\mathbf{k}) = \int \psi_{k_m}^* H \psi_{k_n} d\mathcal{V} = E_0 + N^{-1} \sum_m \sum_n e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)} \int u_0^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) [V(\mathbf{r}) - V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)] u_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) d\mathcal{V} \quad (11.3.27)$$

Dacă în această expresie se iau în considerație numai contribuțiile primilor vecini ai nodului \mathbf{R}_n — în aceasta constă aproximația legăturii strînse (tight binding) — adică dacă în diferențele

$$\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n = (m_1 - n_1) \mathbf{a}_1 + (m_2 - n_2) \mathbf{a}_2 + (m_3 - n_3) \mathbf{a}_3 \quad (11.3.28)$$

se iau numai valorile :

$$m_1 - n_1 = 0, \pm 1; m_2 - n_2 = 0, \pm 1; m_3 - n_3 = 0, \pm 1, \quad (11.3.29)$$

atunci, pentru cazul unei rețele cubice simple ($\mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2 = \mathbf{a}_3 = \mathbf{a}$), expresia (11.3.27) se va reduce la forma :

$$E(\mathbf{k}) = E_0 - \alpha - 2\gamma(\cos k_1 a + \cos k_2 a + \cos k_3 a) \quad (11.3.30)$$

în care s-au folosit notațiile

$$\alpha = -N^{-1} \int u_0^*(\mathbf{r}) [V(\mathbf{r}) - V_0(\mathbf{r})] u_0(\mathbf{r}) d\mathcal{V} \quad (11.3.31)$$

$$\gamma = -N^{-1} \int u_0^*[\mathbf{r} - (\mathbf{R}_{mi} - \mathbf{R}_{mj})] [V(\mathbf{r}) - V_0(\mathbf{r})] u_0(\mathbf{r}) d\mathcal{V}. \quad (11.3.32)$$

Se observă că prin dezvoltarea în serie a cosinuşilor din paranteza expresiei (11.3.30) în jurul valorii $\mathbf{k} \rightarrow 0$ și menținerea doar a primilor doi termeni din aceste dezvoltări, se obține expresia

$$E(\mathbf{k}) = E_0 - \alpha - 2\gamma + a^2 \gamma (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2). \quad (11.3.33)$$

O astfel de expresie pentru energia unui electron „aproape liber” (electron cvasiliber), dintr-o structură cristalină, nu numai că este diferită de energia electronului liber (11.3.20), dar ea pune în evidență și prezența intervalelor energetice interzise. Acestea apar, pentru valorile $k_1 = k_2 = k_3 = \pm n \frac{\pi}{a}$; $n = 1, 2, \dots$, și constituie tocmai benzile de energie inter-

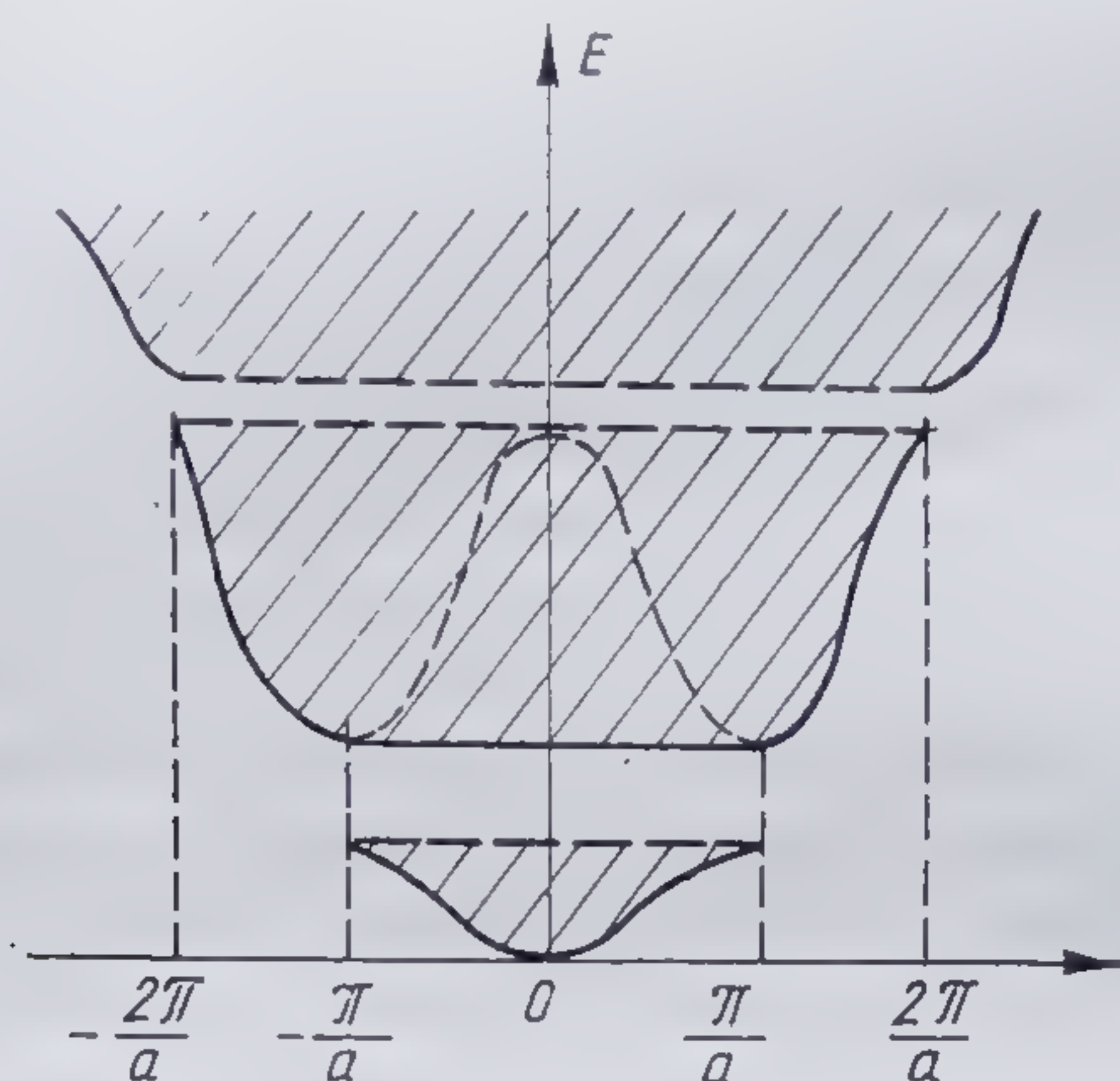


Fig. 11.3.5

zise despre care s-a vorbit mai sus. De exemplu, pentru $n = 1$, benzile energetice pentru o simetrie cubică simplă, vor fi separate între ele cu valoarea $E_g = 12\gamma$.

În figura 11.3.5 este schițată grafic dependența $E = E(k)$ pentru cazul unei rețele unidimensionale, de constantă a , caz pentru care, prin calcule analoge celor prezentate mai sus, se va obține expresia :

$$E(k) = E_0 - \alpha - 2\gamma \cos ka \quad (11.3.34)$$

Se remarcă analogia acestui rezultat cu cel obținut în § 8.8.5, pe baza modelului Kronig Penney. Expresia concretă a dependenței energiei E a electronului de vectorul său de undă k oferă însă și alte informații interesante asupra distribuției stărilor cuantice permise, într-un solid.

Astfel, în punctele $k_n = n \frac{\pi}{a}$; $n = \pm 1, \pm 2, \dots$ se observă că este îndeplinită condiția :

$$\left(\frac{\partial E}{\partial k} \right)_{k=k_n} = 2\gamma a \sin k_n a = 0 \quad (11.3.35)$$

ceea ce înseamnă că graficul lui $E(k)$ va intersecta normal dreptele $k_n = n \frac{\pi}{a}$. Pentru a surprinde, într-o imagine geometrizedată, toate aceste

caracteristici ale dependenței $E = E(k)$, L. Brillouin [47] a reprezentat în spațiul vectorului de undă k , suprafețele pe care sînt îndeplinite condiții de forma (11.3.35) și a obținut astfel celule de forme poliedrice regulate,

care au primit numele de *zone Brillouin*. Prima zonă Brillouin este tocmai celula elementară a rețelei inverse (vezi § 11.2.4).

Nu este greu de constatat că fețele zonelor Brillouin, pentru care $k_n = n \frac{\pi}{a}$, ($n = \pm 1, \pm 2, \dots$), corespund tocmai reflexiilor de tip Bragg, guvernate de legea (11.2.54).

De consemnat de asemenea, că în zonele Brillouin se repetă periodic forma dependenței $E = E(\mathbf{k})$, astfel încât pentru descrierea comportării electronului dintr-o structură cristalină este necesar și suficient să cunoaștem această dependență numai în prima zonă Brillouin (extinderea la alte zone se va face prin translație). Acest rezultat simplifică mult problema studiului teoretic al stării solide și reprezintă, într-un fel, o motivație a faptului că fizica stării solide cristaline (teoria cuantică a acesteia) a progresat atât de mult în ultima vreme, în comparație cu fizica stării lichide.

11.3.2. ZONE BRILLOUIN ȘI SUPRAFETE IZOENERGETICE ÎN SOLID

Vom expune în cadrul acestui paragraf o metodă simplă pentru construirea zonelor Brillouin, bazată pe faptul că fețelor acestor zone în spațiul (\mathbf{k}), le corespund reflexii de tip Bragg.

Să observăm, mai întâi, că în expresia funcției de undă $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, dată de expresia (11.3.16) și care descrie starea cuantică a unui electron într-o structură cristalină, vectorul de undă \mathbf{k} poate fi înlocuit cu vectorul

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}_m \quad (11.3.36)$$

\mathbf{G}_m fiind un vector Miller al rețelei reciproce (§ 11.2.4). Într-adevăr, $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ fiind în același timp funcție proprie a operatorului de translație \hat{T}_n , din (11.3.16), cu (11.2.1), (11.3.5) și (11.2.46), se poate scrie următorul șir de egalități :

$$\begin{aligned} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_n} &= e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G}_m) \cdot \mathbf{R}_n} = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} e^{i(\mathbf{G}_m \cdot \mathbf{R}_n)} \\ &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} e^{2\pi i(n_1 h + n_2 k + n_3 l)} = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n}, \text{ întrucît } e^{2\pi i N} = 1. \end{aligned} \quad (11.3.37)$$

De consemnat, că dacă avem în vedere mărimea

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \quad (11.3.38)$$

care reprezintă impulsul electronului din respectiva structură cristalină, atunci în procesele de ciocnire ale electronilor cu rețeaua vor interveni legi de conservare a impulsului de forma

$$\Delta \mathbf{p} = \begin{cases} 0 \\ \hbar \mathbf{G}_m \end{cases} \quad (11.3.39)$$

Mărimea $\hbar \mathbf{G}_m$ este denumită adesea *quasiimpuls al întregii rețele cristaline*, o lege de forma $\Delta \mathbf{p} = \hbar \mathbf{G}_m$ descriind procese de ciocnire ale electronului cu rețeaua în totalitatea ei.

Desigur, în cazul reflexiilor de tip Bragg, $\Delta p = 0$ (întrucât electronii sînt reflectați de către rețea) astfel încît, cu $k' = k$, relația (11.3.36) poate fi scrisă și sub forma :

$$k^2 = (k - G_m)^2 \text{ sau } 2kG_m = G_m^2 \quad (11.3.40)$$

Ultima egalitate reprezintă o altă modalitate de exprimare a legii lui Bragg (11.2.54). Ea ne oferă o cale simplă pentru construirea zonelor Brillouin.

Astfel, pentru o rețea plană pătratică, de constantă a , cu axele cristaline orientate în lungul axelor Ox și respectiv Oy , vom putea scrie

$$G_m = \frac{2\pi}{a} (l_1 i + l_2 j); \quad k = k_x i + k_y j \quad (11.3.41)$$

Înlocuind aceste expresii în (11.3.40), obținem :

$$k_x l_1 + k_y l_2 = \frac{\pi}{a} (l_1^2 + l_2^2) \quad (11.3.42)$$

Această egalitate trebuie să fie satisfăcută pentru toate valorile naturale ale lui l_1 și l_2 , deci pentru $l_1 = 0, \pm 1, \dots, l_2 = 0, \pm 1, \dots$, valori ce corespund reflexiilor Bragg de diverse ordine și deci, implicit, diverselor zone Brillouin.

Prima zonă Brillouin va corespunde atunci următoarelor valori

$$l_1 = 0, l_2 = \pm 1 \Rightarrow k_y = \pm \frac{\pi}{a}; \quad l_1 = \pm 1, l_2 = 0; \Rightarrow k_x = \pm \frac{\pi}{a}$$

Reprezentată în planul $Ok_x k_y$ (fig. 11.3.6) al spațiului (k), o astfel de primă zonă Brillouin este de forma pătratului mic hașurat, de latură $2\pi/a$. Pe

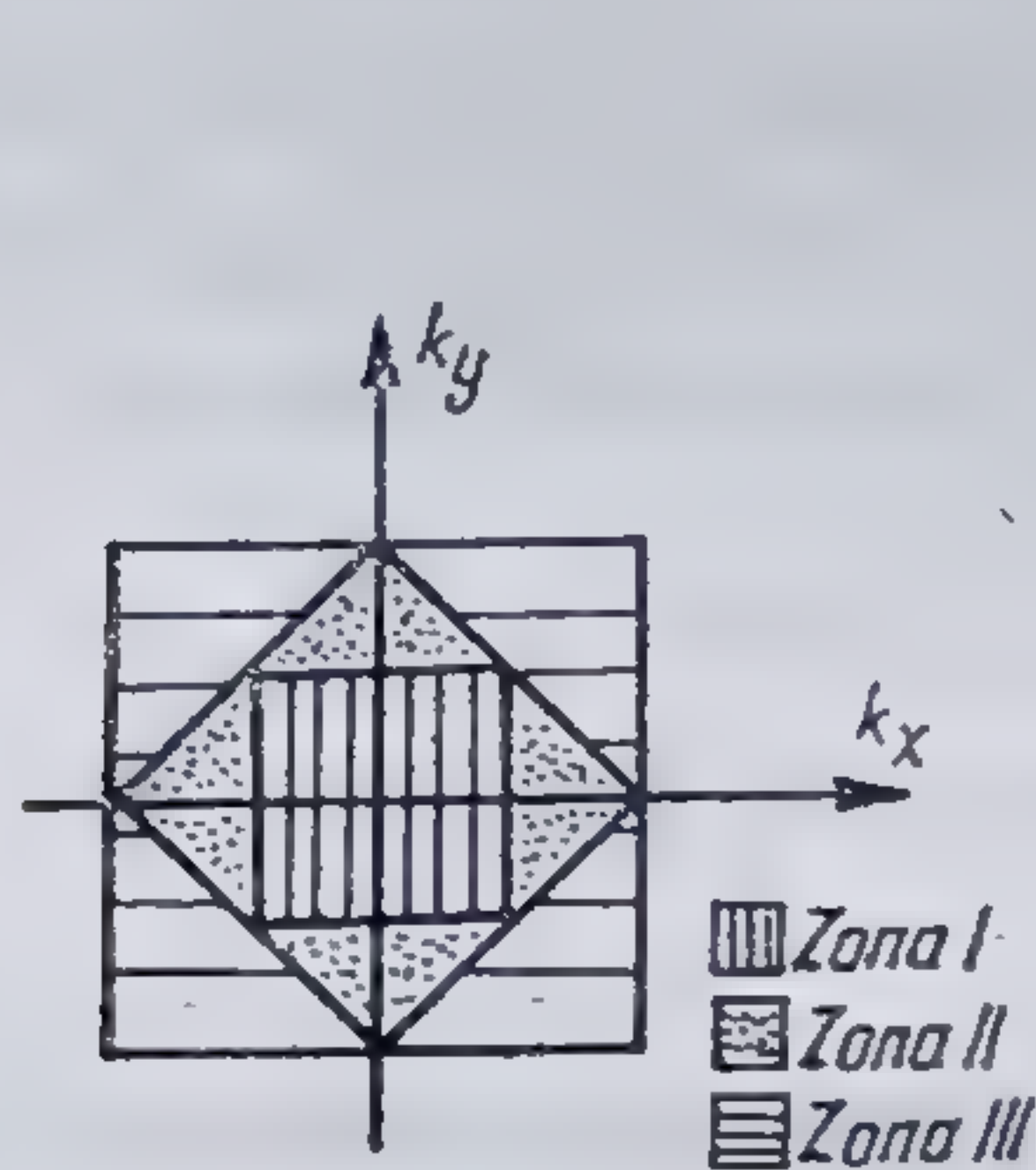


Fig. 11.3.6

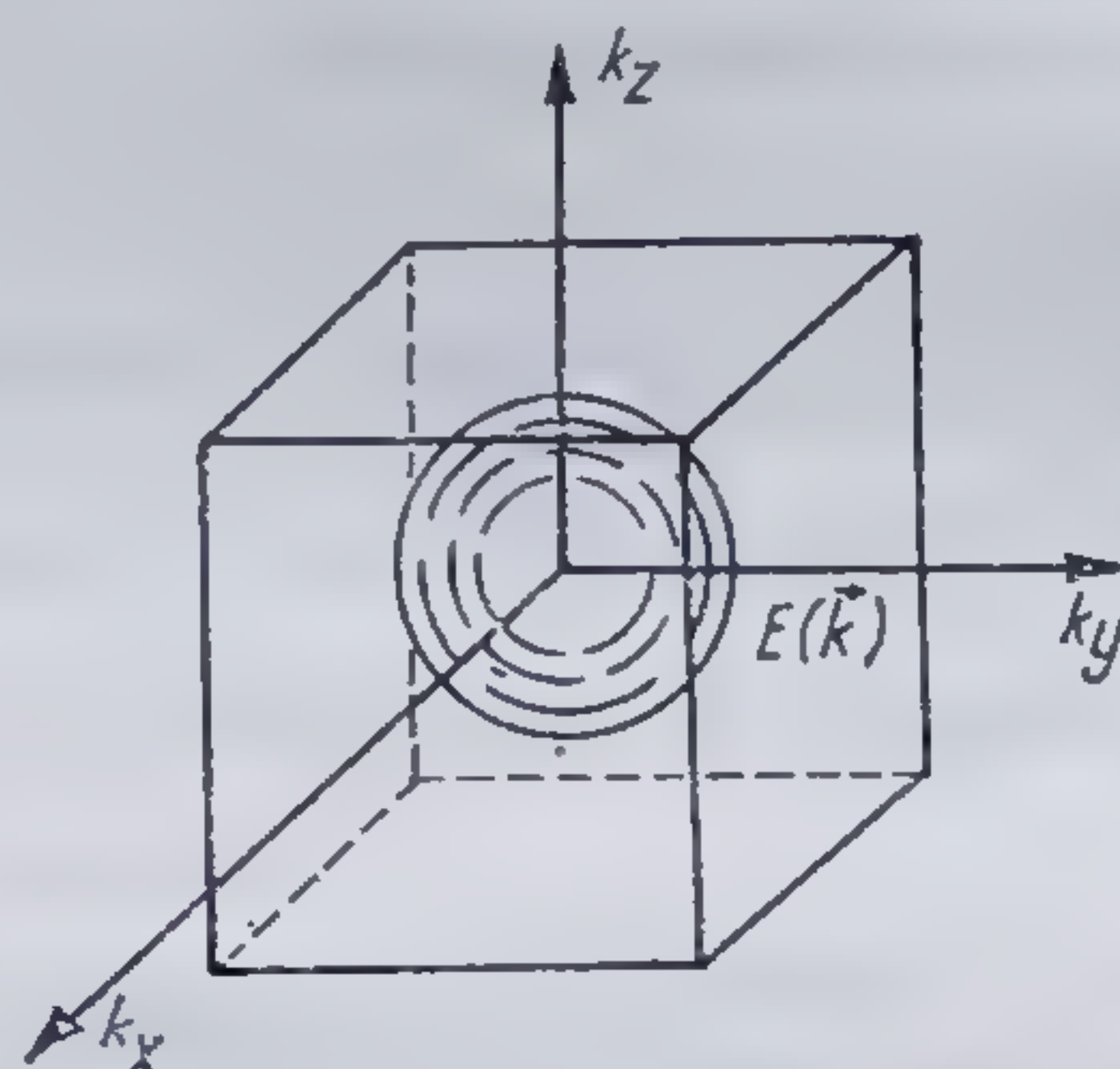


Fig. 11.3.7.

aceea și figură sînt reprezentate (prin hașuri diferite) și zona II-a, respectiv a III-a Brillouin, pentru care $(l_1 = \pm 1; l_2 = \pm 1)$, respectiv $(l_1 = \pm 1; l_2 = \pm 2)$.

Pentru rețele cristaline tridimensionale se vor obține, funcție de simetria acestora, zone Brillouin de forma unor poliedre regulate. În figura 11.3.7 este schițată prima zonă Brillouin a rețelei cubice simple (care este

în același timp și celula elementară a rețelei reciproce, așa cum s-a menționat mai sus), iar în figura 11.2.21, b a fost reprezentată prima zonă Brillouin a rețelei cubice cu volum centrat.

Locul geometric al punctelor din spațiul (k), în care energia electronului $E(k)$ are aceeași valoare, poartă denumirea de *suprafață izoenergetică*. De exemplu, în aproximația $k \simeq 0$, întrucât electronul se comportă ca un electron liber și va avea energia dată de expresia (11.3.20), suprafața izoenergetică va fi de formă sferică (fig. 11.3.7). De remarcat că, o dată cu creșterea lui E , va crește și raza k a acestei sfere și, la un moment dat, ea va atinge fețele primei zone Brillouin. În conformitate cu (11.3.35) însă, această atingere trebuie să se facă ortogonal (pe fețele zonelor Brillouin, $\nabla_k E(k) = 0$, în conformitate cu (11.3.35)). De aceea, suprafața sferică se va deforma, luând o formă complexă, așa cum se vede pe figura 11.3.8. În felul acesta se relevă dependența foarte complicată de vectorul de undă k a energiei electronilor situați în imediata vecinătate a benzilor de energie interzise. Or, în multe cazuri de interes practic major, cum sînt fenomenele de transport din semiconductoare și semimetale, intervin tocmai electronii din aceste stări. Acest fapt complică extrem de mult dezvoltarea pe cale teoretică a studiului stărilor electronice din solid, dar au fost create metode pentru depășirea acestor dificultăți, una dintre ele fiind cunoscută ca *metoda masei efective*.

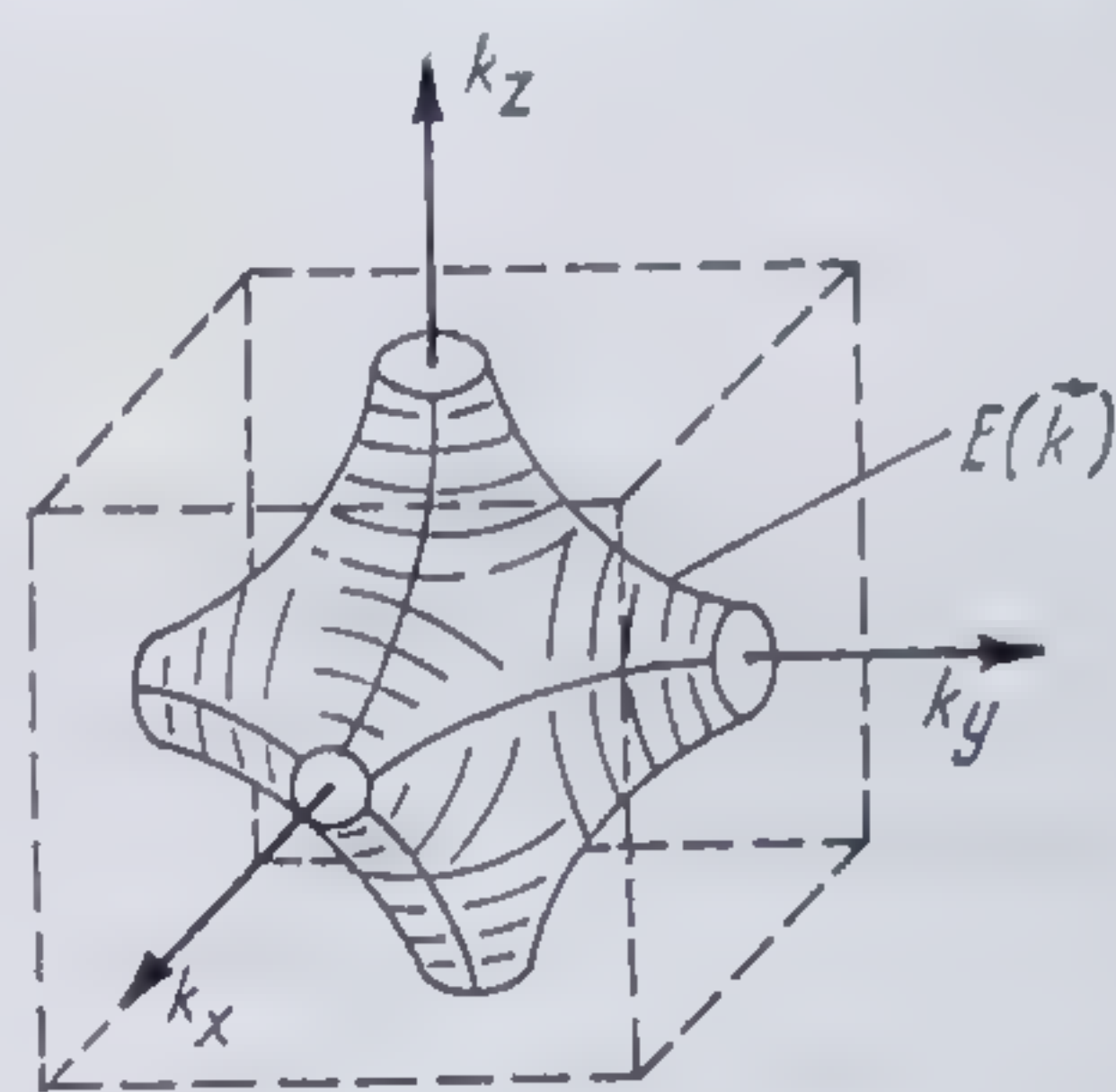


Fig. 11.3.8.

11.3.3. MASA EFECTIVĂ A ELECTRONULUI ÎN STRUCTURI CRISTALINE ȘI METODE EXPERIMENTALE DE DETERMINARE A EI

Se știe că masa electronului, ca măsură a inerției sale, intervine în mod explicit în legile fenomenelor de transport. Dacă la astfel de fenomene participă electronii din structura cristalină, atunci desigur că aceștia nu vor fi supuși nu numai acțiunii forțelor exterioare (cum sînt cele create de cîmpurile electrice sau de gradientele de temperatură), ci și acțiunii unor forțe interioare, generate de cîmpurile electrice cristaline interne. Aceste cîmpuri au însă structuri la fel de complexe ca ale structurilor cristaline și, de aceea, calcularea contribuției lor la fenomenele de transport devine o problemă de aceeași complexitate ca și problema stabilirii funcției $E = E(k)$.

În aproximația *masei efective a electronului din solid* se pleacă de la ideea că pentru un electron liber, nerelativist, masa proprie m_e poate fi calculată din expresia (11.3.20). Într-adevăr, se vede că avem

$$m_e^{-1} = \hbar^{-2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \quad (11.3.43)$$

expresie care poate fi scrisă și sub forma

$$m_e^{-1} = \hbar^{-2} \nabla_{\mathbf{k}}^2 E(\mathbf{k}); \text{ cu } \nabla_{\mathbf{k}}^2 = \frac{\partial^2}{\partial k^2}. \quad (11.3.44)$$

Atunci, pentru cazurile în care dependența de \mathbf{k} a energiei electronului este complexă (de forma 11.3.34, de exemplu) vom defini, în locul lui m_e , un *tensor masă efectivă*, prin relația

$$m_{ij}^{*-1} = \hbar^{-2} \nabla_{\mathbf{k}i} \nabla_{\mathbf{k}j} E(\mathbf{k}). \quad (11.3.45)$$

Componentele acestui tensor reprezintă inerția efectivă a electronului la acțiunea unei forțe exterioare, orientată pe o anumită direcție față de axele cristaline, inerție care de fapt include și acțiunea câmpului cristalin intern asupra respectivului electron. De aceea, componentele m_{ij}^* ale acestui tensor poartă numele de masă efectivă a electronului.

Se poate observa că masa efectivă a electronului este, în general, o mărime tensorială ale cărei componente depind atât de tipul simetriei cristaline, cât și de direcția în raport cu axele cristaline după care este acționat din exterior electronul. Dar dacă se admite că câmpul cristalin intern are o structură izotropă (ipoteză neadevărată pentru structurile cristaline, dar acceptabilă în primă aproximație pentru studiul electronilor de conducție din structurile metalice, care resimt slab prezența nodurilor ionice pozitive ale acestora), atunci tensorul (m_{ij}^*) se va reduce la un scalar m^* , a cărui valoare poate fi, în general, diferită de m_e . Cîteva exemple de acest fel sînt prezentate în tabelul următor, pentru structuri metalice. Se constată că raportul m^*/m_e poate fi atât supraunitar, cât și subunitar.

Structura metalică	Be	Ca	Na	Li	K	Cu	Al	Zn
m^*/m_e	1,6	1,4	1,2	1,2	1,1	1,012	0,98	0,85

Dacă se cunoaște funcția $E(\mathbf{k})$, pe baza expresiei (11.3.45) pot fi calculate imediat componentele tensorului m_{ij}^* . Așa, de exemplu, dacă $E(\mathbf{k})$ este dată de expresia (11.3.34) se obțin componentele

$$m_{11}^* = m_{22}^* = m_{33}^* = \frac{\hbar^2}{a^2 \gamma}. \quad (11.3.46)$$

Problema poate fi pusă însă și invers și anume, dacă se cunosc componentele tensorului masă efectivă m_{ij}^* , să se determine dependența $E = E(\mathbf{k})$, mai ales că așa cum s-a menționat mai sus, stabilirea unei astfel de dependențe pe cale teoretică este o problemă extrem de dificilă. De aceea, au fost concepute și realizate cîteva metode experimentale de determinare a componentelor tensorului m_{ij}^* . Cu valorile acestor componente s-au construit suprafețele izoenergetice din spațiul (\mathbf{k}), pentru structurile de interes practic deosebit, cum sînt cele ale Ge și Si.

Există următoarele metode experimentale de determinare a componentelor tensorului m_{ij}^* : a) studiul spectrelor de radiații X caracteristice, emise de structuri solide (studiul lărgimii acestor linii), b) rezonanța ciclotronică în metale și semiconductori, c) efectul de Haas-van Alfen [79], d) studiul magnetorezistenței (§ 11.8), e) determinarea căldurii specifice electronice la metale, la temperaturi scăzute (§ 10.4.2), f) studiul efectului pelicular (skin) (§ 6.10) etc. Aici va fi expusă succint numai metoda rezonanței ciclotronice, celelalte metode fiind amintite în contextul altor paragrafe.

Rezonanța ciclotronică este un fenomen asemănător cu fenomenele de rezonanță magnetică electronică de spin. Anume, dacă electronii de conducție (respectiv golurile) se află într-un câmp magnetic de inducție \mathbf{B} , atunci ei vor executa mișcări circulare în jurul lui \mathbf{B} , cu frecvență ciclotronică

$$\nu_e = \frac{|e|\hbar B}{4\pi m^*}. \quad (11.3.47)$$

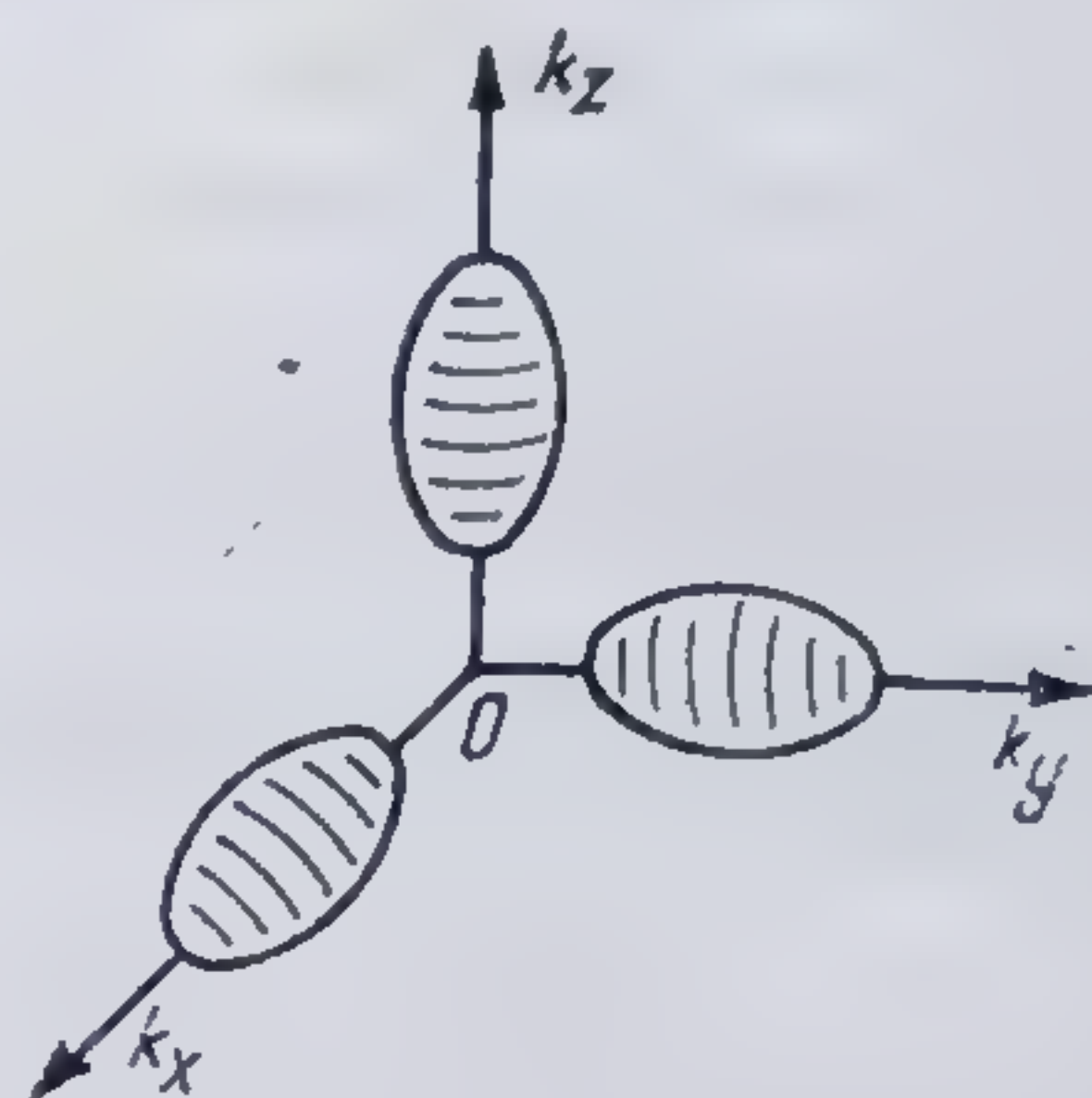


Fig. 11.3.9

Această frecvență ciclotronică se poate determina foarte exact, deoarece ea se evidențiază printr-un maxim ascuțit de absorbție, dacă structura respectivă este introdusă într-un câmp de microunde, în locul în care componenta sa electrică este maximă (la fel ca în cazul rezonanței paramagnetice de spin, vezi §. 10.6).

Orientînd cristalul pe diferite direcții în raport cu \mathbf{B} se pot determina valorile componentelor tensorului m_{ij}^* pe aceste direcții. Măsurători de acest fel, făcute pe cristalul de germaniu — important material semiconductor au condus la concluzia că masa efectivă a electronilor de conducție m_e^* este diferită de masa efectivă m_g^* a golurilor. De exemplu, valorile lor pe direcția $[111]$, a rețelei cubice a Ge, sînt: $m_{||e}^* = 1,6 m_e$; $m_{||g}^* = 0,34 m_e$, respectiv pe o direcție normală la axa $[111]$, $m_{\perp e}^* = 0,082 m_e$ și $m_{\perp g}^* = 0,042 m_e$. Cu ajutorul acestor valori s-au construit suprafețele izoenergetice, care au forma celor indicate în figura 11.3.9.

11.3.4. POPULAREA CU ELECTRONI A BENZILOR DE ENERGIE PERMISE. STRUCTURA METALICĂ, SEMICONDUCTOARE ȘI DIELECTRICĂ

Electronii, fiind particule cu spinul $1/2$, fac parte din clasa fermionilor și, de aceea, vor popula stările din cadrul benzilor permise de energie în conformitate cu principiul de excluziune al lui Pauli. Numărul de stări dintr-o bandă permisă, respectiv dintr-o zonă Brillouin, este determinat de volumul acestei zone, stările vecine fiind separate între ele prin condiții de forma (11.3.37), respectiv prin

$$-\pi \leq k_i G_i \leq \pi; \quad i = 1, 2, 3 \quad (11.3.48)$$

Rezultă că, pentru o structură cu N_i noduri în lungul axelor cristaline a_i , stările cuantice vecine sînt separate între ele, prin intervalele

$$\Delta k_i = \frac{1}{N_i} b_i \quad (11.3.49)$$

Prin urmare, aceste stări sînt cu atît mai apropiate unele de altele cu cît N_i este mai mare. Elementul de volum minim, din spațiul (k), căruia îi corespunde o singură stare va fi dat atunci de expresia

$$\Delta \mathcal{V}_{k \min} = \Delta k_1 (\Delta k_2 \times \Delta k_3) = \frac{b_1 \cdot (b_2 \times b_3)}{N_1 N_2 N_3} \quad (11.3.50)$$

Ținînd cont de relațiile (11.2.44) și notînd prin $N = N_1 N_2 N_3$ numărul total de noduri ale rețelei (respectiv ale celulei elementare), obținem

$$\Delta \mathcal{V}_{k \min} = \frac{(2\pi)^3}{N \mathcal{V}_0} \quad (11.3.51)$$

$\mathcal{V}_0 = \mathbf{a}_1(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$ fiind volumul celulei elementare Bravais.

Din considerentele de mai sus rezultă că în unitatea de volum a spațiului (k) există

$$\Gamma = \frac{1}{\Delta \mathcal{V}_{k \min}} = \frac{N \mathcal{V}_0 g_i}{(2\pi)^3} \quad (11.3.52)$$

stări electronice distincte, g_i reprezentînd gradul de degenerare al unui subnivel din cadrul respectivei benzi permise. Vor exista deci

$$d\Gamma = \frac{N \mathcal{V}_0 g_i}{(2\pi)^3} dk_x dk_y dk_z \quad (11.3.53)$$

stări distincte într-un element de volum (d^3k) = $dk_x dk_y dk_z$ al spațiului (k).

Popularea acestor stări cu electroni se face în conformitate cu legea de distribuție Fermi-Dirac (9.5.15) și anume, la 0 K fiecare dintre aceste stări este populată cu $2g_i$ electroni. Această populare se va face în mod complet, pînă la un anumit nivel de energie E_F , care este tocmai *nivelul Fermi* E_F (§.9.5).

Suprafața $E = E_F(\mathbf{K}_F)$, din spațiul (k), se numește *suprafață Fermi* și ea separă, la 0 K, stările din ultima zonă Brillouin populate cu electroni, de stările nepopulate. Se constată ușor că funcție de poziția nivelului Fermi față de limitele superioară, respectiv inferioară ale benzilor permise se va stabili și forma geometrică, din spațiul (k), a suprafețelor Fermi și, implicit, comportarea metalică sau nemetalică a respectivei structuri cristaline.

Într-adevăr, ținînd cont de faptul că o bandă energetică permisă conține N subnivele energetice (N — fiind numărul de noduri din celula elementară), fiecare degenerat de $2g_i$ ori (2 fiind degenerarea de spin), rezultă că dacă structura cristalină va conține un număr impar de electroni pe celula elementară, atunci ultima ei bandă permisă va fi, la 0 K, populată

cu electroni numai pe jumătate (fig. 11.3.10, a). Nivelul Fermi E_F se va găsi, în acest caz, în interiorul acestei benzi permise și, prin urmare, electronii vor avea posibilitatea să treacă deasupra lui, prin ușoare excitări ter-

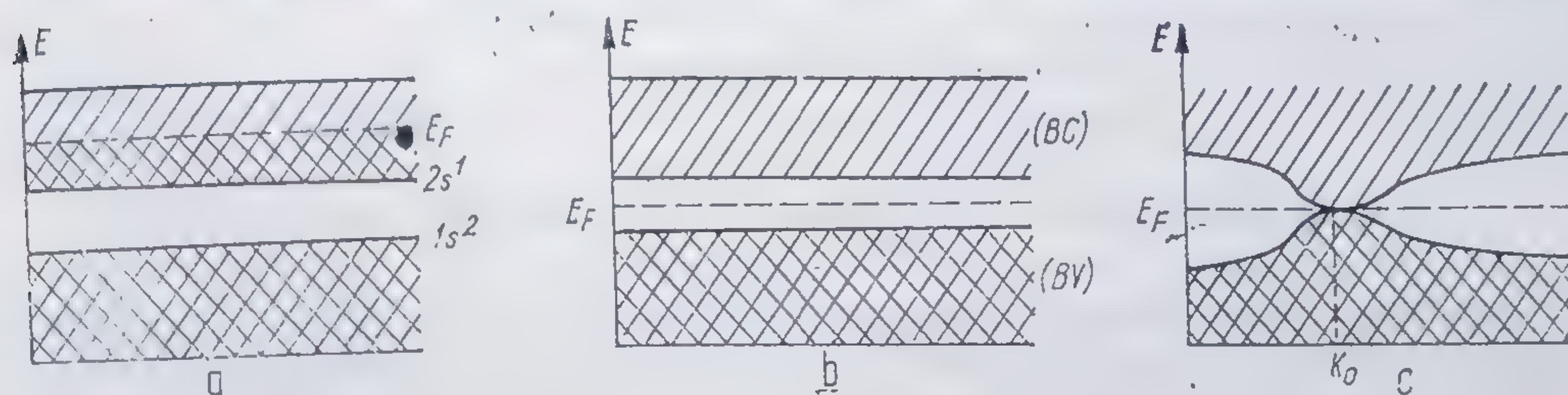


Fig. 11.3.10

mice la $T > 0$ K, comportându-se ca veritabili electroni liberi. Ei determină un *caracter metalic* structurii respective.

Experiența confirmă o astfel de previziune a teoriei, toate structurile formate din elemente alcaline (${}_3\text{Li}$, ${}_{11}\text{Na}$, ${}_{19}\text{K}$, ${}_{37}\text{Rb}$ și ${}_{55}\text{Cs}$), sau din elementele nobile univalente, (${}_{29}\text{Cu}$, ${}_{47}\text{Ag}$, ${}_{79}\text{Au}$), realizând structuri cristaline metalice. La ${}_3\text{Li}$, de exemplu, aflat în structură cristalină, banda $1s^2$ este complet populată cu cei $2N$ electroni de tip $1s$, iar banda $2s$ este populată doar pe jumătate cu cei N electroni $2s$ (fig. 11.3.10, a). De aceea, nivelul Fermi E_F se va situa la mijlocul benzii permise $2s$, iar suprafața Fermi $E_F(k)$ va avea, în spațiul (k), o formă sferică (fig. 11.3.7).

Structurile cristaline a căror bază posedă un număr par de electroni pe celula elementară ar trebui, în consecință, să manifeste fie proprietăți dielectrice, fie proprietăți semiconductoare, după cum lărgimea E_g a benzii interzise, care separă ultima bandă permisă complet populată (fig. 11.3.10b), numită *bandă de valență* (BV), de următoarea bandă permisă, complet liberă și numită *bandă de conducție* (BC), este de ordinul a $0,1 \div 3$ eV, în cazul semiconductoarelor sau mai mare, în cazul dielectricilor (vezi și §11.4.2). Într-adevăr, structura fluorurii de litiu (LiF), în care celulei elementare îi revin 12 electroni (2 electroni $1s^2$ ai Li^+ și 10 electroni $1s^2 2s^2 2p^6$ ai F^-), manifestă proprietăți dielectrice tipice ($E_g > 3$ eV), iar structurile cristaline ale Ge și Si (elemente tetravalente) sînt structuri cu proprietăți tipice semiconductoare ($E_g < 3$ eV).

Dar lucrurile nu stau în toate cazurile atît de simplu. De exemplu, structurile formate din elemente bivalente ca : ${}_4\text{Be}$, ${}_{12}\text{Mg}$, ${}_{20}\text{Ca}$, ${}_{30}\text{Zn}$, ${}_{38}\text{Sr}$, ${}_{48}\text{Cd}$, ${}_{56}\text{Ba}$, ${}_{80}\text{Hg}$ etc., ar trebui să manifeste proprietăți dielectrice sau semiconductoare, ori ele sînt metale tipice. De asemenea, dintre elementele trivalente (${}_5\text{B}$, ${}_{13}\text{Al}$, ${}_{31}\text{Ga}$, ${}_{49}\text{In}$, ${}_{81}\text{Te}$), care potrivit celor de mai sus ar trebui să manifeste toate comportament metalic, numai ${}_{13}\text{Al}$ are o astfel de comportare, ${}_5\text{B}$ este semiconductor. Hidrogenul în stare solidă se comportă ca dielectric, la presiuni foarte mari cîștigînd calități de conductor, probabil chiar de supraconductor.

Caracterul metalic sau nemetalic al unei structuri cristaline formată din elemente bivalente se poate explica prin acoperirea parțială sau totală

a benzilor de energie s și p permise. Această acoperire se poate realiza fie numai pe anumite intervale de valori ale lui k (așa cum se vede în fig. 11.3.10 c), fie pentru orice valoare k . Dacă acoperirea benzilor se reduce la intervale mici ale lui k , atunci avem de a face cu o comportare *semimetalică*, o astfel de comportare tipică manifestând bismutul.

11.3.5. DENSITATEA DE STĂRI ENERGETICE DIN SOLID

Și în cazul stării solide, ca și în cel atomic și molecular, prezintă aceeași interes calcularea unor valori medii ale variabilelor cuantice, care descriu starea electronilor din benzile de energie permise, ceea ce presupune o cunoaștere de detaliu a distribuției subnivelelor energetice din cadrul acestor benzi. Pentru exprimarea unei astfel de distribuții se folosește noțiunea de *densitate energetică de stări* $\rho(E)$, definită prin relația (8.8.31). Desigur, pentru electroni liberi (deci electroni ale căror stări sînt situate la mijlocul benzilor permise), densitatea energetică de stări este de formă (8.8.34), adică

$$\rho(E) = \frac{2\pi g_i}{h^3} (2m^*)^{3/2} \sqrt{E}. \quad (11.3.54)$$

O astfel de distribuție a stărilor se întâlnește în cadrul benzilor de tip s (fig. 11.3.11, a), la celelalte benzi intervenind distribuții mult mai com-

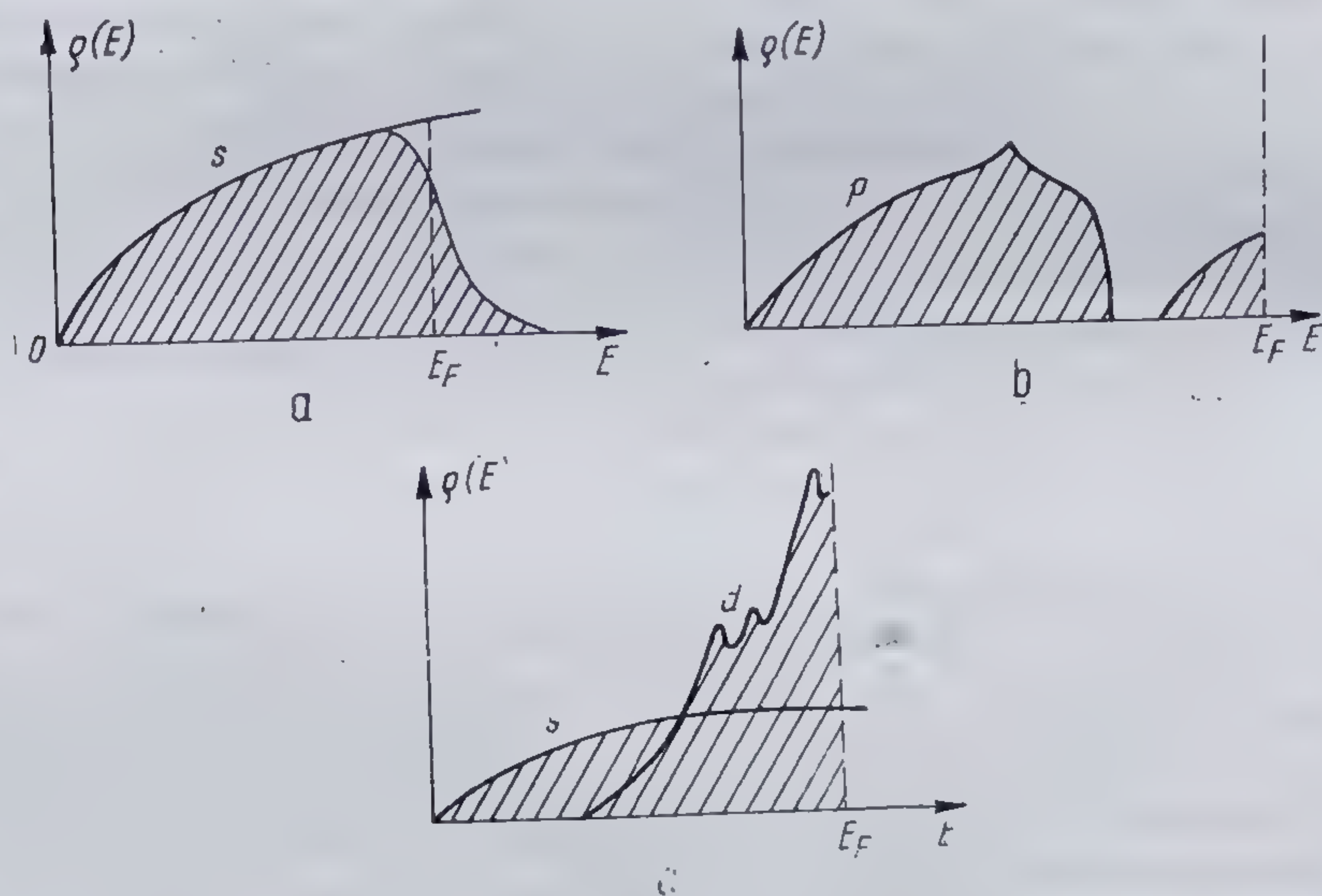


Fig. 11.3.11

plexe (fig. 11.3.11, b și c). Se remarcă valoarea ridicată a densității stărilor energetice din apropierea nivelului Fermi, pentru cazul metalelor de tranziție (fig. 11.3.11, c). La aceste metale, majoritatea electronilor de con-

ducție se găsească în imediata apropiere a nivelului Fermi E_F și aceasta explică o serie de aspecte specifice ale comportării electrice și magnetice ale acestor metale.

§ 11.4. PROPRIETĂȚI ELASTICE ȘI TERMICE LA SOLID

Proprietățile fizice ale solidului pot fi grupate în două mari clase, după cum aceste proprietăți sînt determinate de starea de mișcare și de interacțiunile dintre microparticulele localizate în nodurile rețelei cristaline, care formează *baza structurii*, sau sînt determinate de mișcarea electronilor liberi și cvasiliberi, nelocalizați (sau colectivizați), dar supuși unei influențe, mai puternice sau mai slabe din partea bazei respectivei structurii. Este adesea avantajos ca studiul acestor proprietăți să se facă separat, pe fenomene determinate fie de electronii colectivizați ai structurii, fie de rețeaua însăși (înțelegînd aici prin rețea, baza structurii date). Un astfel de studiu este indicat a se face mai ales atunci cînd contribuția celor două categorii de fenomene este mult diferită. De exemplu, în studiul proprietăților elastice, termice, dielectrice și magnetice ale multor structuri cristaline și îndeosebi ale celor cu legături ionice și moleculare, se pot lua în considerație numai stările de mișcare ale rețelei cristaline, neglijîndu-se într-o primă aproximație, contribuția electronilor colectivizați din structură, sau evaluîndu-se separat această contribuție. În schimb, în cazul fenomenelor de transport din structuri metalice, contribuția electronilor va fi preponderentă.

În continuare vor fi tratate, într-o astfel de viziune, care desigur aproximează realitatea, principalele proprietăți fizice ale stării solide cristaline.

11.4.1. PROPRIETĂȚI ELASTICE

Majoritatea proprietăților mecanice ale solidului (elasticitatea, plasticitatea, rigiditatea mecanică etc.) sînt determinate de starea de mișcare a rețelei cristaline. Elasticitatea, de exemplu, adică proprietatea solidului deformat de a reveni la forma inițială, atunci cînd forțele deformatoare își încetează acțiunea, este legată direct de interacțiunile dintre constituenții bazei, aflați în nodurile rețelei. Se constată însă că forțele de interacțiune își păstrează caracterul de forțe elastice (adică $F = k_e \cdot u$; k_e fiind constanta de elasticitate, iar u — deformația liniară) numai atît timp cît deformațiile sînt mici, respectiv numai pentru deplasări u_i de valori mici ale nodurilor rețelei cristaline față de pozițiile lor de echilibru. La depășirea unor valori critice, deformația își pierde caracterul de deformație elastică, devenind o deformație plastică, în care corpul deformat nu mai revine, după încetarea acțiunii forței deformatoare, la forma sa inițială.

Efectele macroscopice pe care le generează deformările elastice sau plastice, precum și alte caracteristici mecanice ale solidului pot fi studiate în aproximația unei distribuții evasicontinue, omogene și izotrope a solidului. Desigur că în astfel de studii vor interveni caracteristicile medii, macroscopice ale solidului, care uneori pot face abstracție de însăși simetria cristalină a solidului (cazul corpurilor policristaline).

Există însă și situații în care aproximația menționată mai sus nu mai este satisfăcătoare. De exemplu, dacă o perturbație produsă într-un mediu solid se transmite de la un nod al rețelei la altul, sub forma unor unde elastice, a căror lungime de undă λ este de ordinul de mărime al constantelor cristaline a , atunci desigur că în propagarea acestor unde va trebui să se releve și structura cristalină a respectivului mediu.

Într-adevăr, să admitem că mediul solid este constituit dintr-un șir reticular liniar, în nodurile căruia se găsește microparticule identice de masă m_p , constanta rețelei fiind a (fig. 11.4.1). Dacă în nodul n s-a produs o perturbație care constă într-o deplasare a acestui nod în lungul șirului, pe distanța u_n și dacă prin intermediul unor forțe de tip elastic

$$\mathbf{F}_n = -k_e \mathbf{u}_n \quad (11.4.1)$$

această deformare se transmite nodurilor vecine, avînd valoarea u_{n+1} la nodul $n+1$, respectiv u_{n-1} la nodul $n-1$, atunci ecuația clasică de mișcare a nodului n va fi dată de expresia

$$m_p \ddot{u}_n = F_{n+1} - F_{n-1} \quad (11.4.2)$$

respectiv, cu forțe de tipul (11.4.1), de

$$m_p \ddot{u}_n = k_e(u_{n+1} - u_n) - k_e(u_n - u_{n-1}) = k_e(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) \quad (11.4.3)$$

În cazul unor deformații mici ($u_n \simeq 0$), mișcările oscilatorii ale nodului n vor fi armonice și deci soluțiile ecuației (11.4.3) vor trebui să fie funcții armonice, de forma

$$u_n(x, t) = u_0 e^{i(\omega t - kx_n)}; \quad x_n = na \quad (11.4.4)$$

Înlocuind această expresie în ecuația (11.4.3), prin calcule simple se obține

$$m_p \omega^2 = k_e(e^{ika} + e^{-ika} - 2) \quad (11.4.5)$$

Dar se vede că putem scrie egalitatea: $e^{ika} + e^{-ika} - 2 = \left(e^{\frac{ika}{2}} - e^{-\frac{ika}{2}}\right)^2 = 4 \sin^2 \frac{ka}{2}$, astfel încît, din (11.4.5) rezultă

$$\omega(k) = \omega_m \sin \frac{ka}{2}; \quad \omega_m = \sqrt{\frac{4k_e}{m_p}} \quad (11.4.6)$$

Această relație leagă pulsația ω a mișcării oscilatorii a nodurilor rețelei de vectorul k al undei ce ia naștere în rețea. De aceea, relația (11.4.6) reprezintă *legea de dispersie* a undelor elastice din structuri cristaline unidimensionale.

Este demn de remarcat faptul că potrivit acestei legi de dispersie pulsația undei ω depinde periodic de numărul de undă k , așa cum se indică pe figura 11.4.2, dependența $\omega(k)$, repetându-se periodic, pe intervale de valori ale lui k egale cu π/a .

Cuantificând energia acestor unde elastice, prin relația :

$$E = \hbar \omega \quad (11.4.7)$$

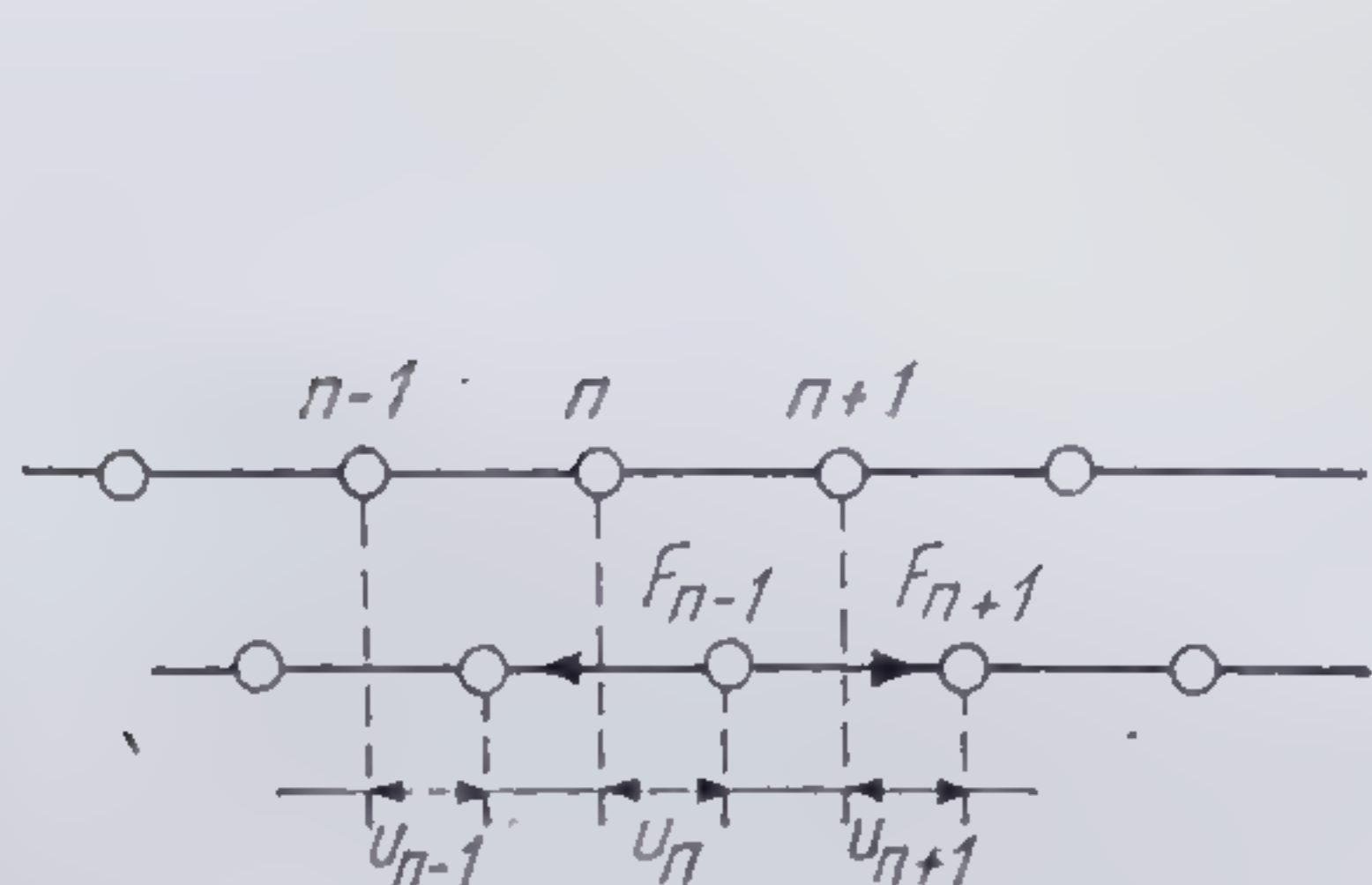


Fig. 11.4.1

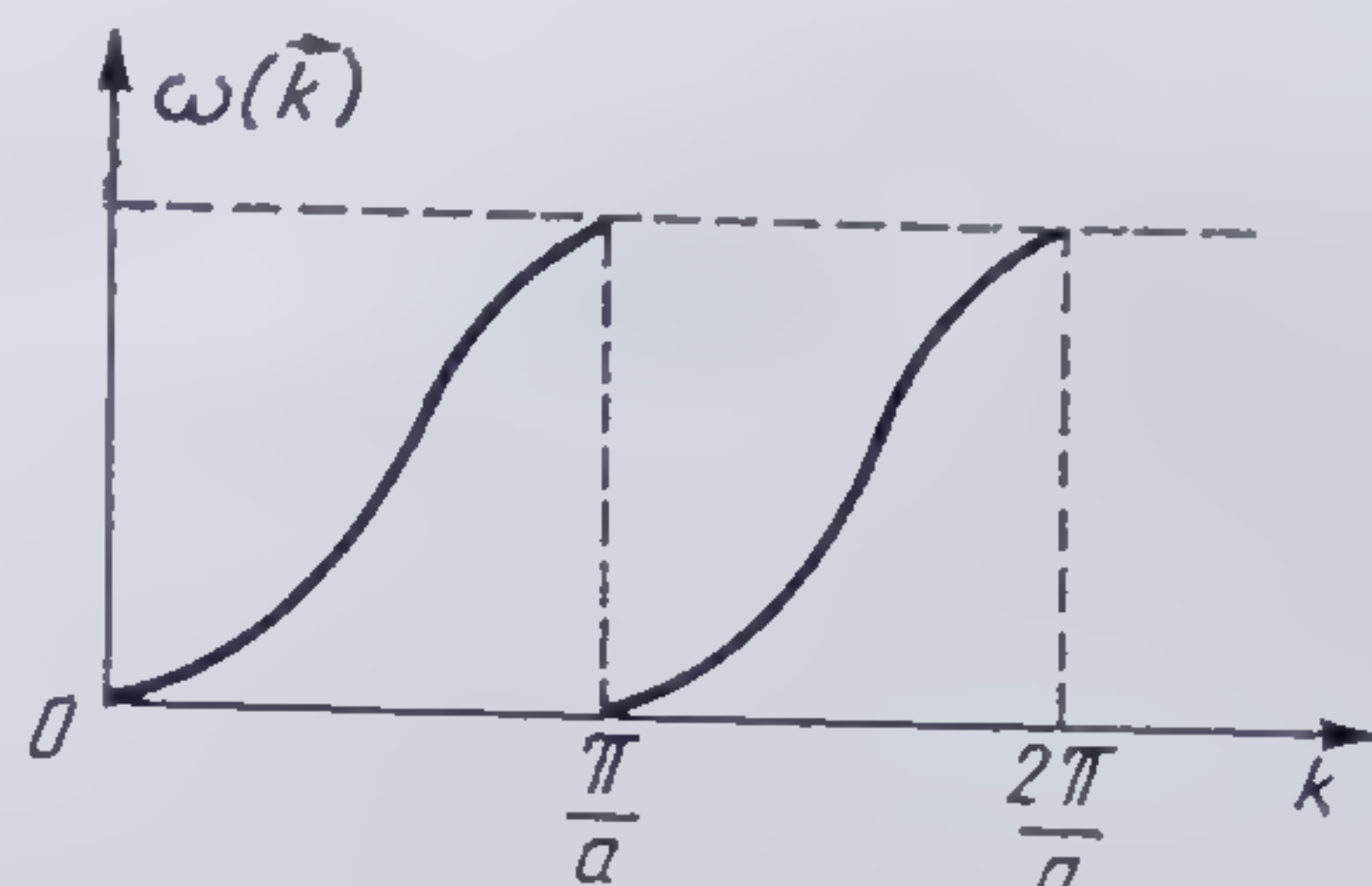


Fig. 11.4.2.

care exprimă energia unei cuante de vibrație, denumită *fonon*, obținem pentru fononi o expresie a energiei de forma

$$E(k) = \hbar \omega_m \sin \frac{ka}{2}. \quad (11.4.8)$$

Reprezentarea grafică a acestei energii, în spațiul (k), este de forma curbilor de dispersie prezentate în fig. 11.4.2. Se constată că intervalul $k \in \left[0, \frac{\pi}{a}\right]$ reprezintă prima zonă Brillouin pentru respectivi fononi. De consemnat, de asemenea, că și în acest caz suprafețele izoenergetice ale fononilor intersectează normal fețele zonelor Brillouin, întrucât :

$$\left(\frac{\partial E}{\partial k} \right)_{k=\pm n\frac{\pi}{a}} = \frac{\hbar \omega_m a}{2} \cos \frac{n\pi}{2} = 0; \quad n = 1, \pm 2. \quad (11.4.9)$$

În acest mod, simetria rețelei cristaline „se oglindește” în simetria legilor de mișcare ale fononilor, respectiv în legile de propagare ale undelor elastice din rețeaua respectivă. Dar o astfel de oglindire este relevantă numai pentru cazul când $\lambda \lesssim a$, respectiv numai dacă este îndeplinită condiția

$$ka = \frac{2\pi}{\lambda} a \gtrsim 1. \quad (11.4.10)$$

Aceasta înseamnă că, pentru rețele cu $a = 3 \text{ \AA}$ și viteze de propagare $c = 3 \cdot 10^3 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, este vorba de unde cu frecvențe de ordinul $\nu = \frac{c}{a} = 10^{13} \text{ Hz}$, adică de unde din gama hipersunetelor. În cazul undelor elas-

țice de frecvențe mai scăzute, pentru care $ka \ll 1$, se pot face următoarele aproximații :

$$\omega \simeq \omega_m \frac{ka}{2} \Rightarrow \frac{2\pi}{T} = \sqrt{\frac{4k_e}{m_e}} \cdot \frac{2\pi}{2\lambda} a = 2 \sqrt{\frac{k_e}{m_p}} \cdot \frac{\pi a}{cT}, \quad (11.4.11)$$

care, cu $c = \sqrt{\frac{E}{\rho}}$ și $\rho = \frac{m_p}{a}$, conduce la $k_e = \frac{E}{a}$, E fiind modulul lui Young. Se constată astfel că respectiva undă elastică devine o undă elastică obișnuită, în a cărei lege de dispersie $\omega = kc$ nu se mai „simte” prezența rețelei cristaline.

De consemnat că studiul expus mai sus se poate extinde ușor și la cazul rețelelor tridimensionale, putînd fi făcut și într-un limbaj cuantic [49], dar rezultatul esențial este de aceeași formă și anume, se obțin expresii ale energiei fononilor care depind de k și respectiv de forma zonelor Brillouin. Dacă baza structurii cristaline este formată din microparticule de două feluri diferite ($m_{p1} \neq m_{p2}$), care alternează în popularea nodurilor, cum este cazul cristalelor de clorură de sodiu ($m_{Cl} > m_{Na}$), atunci un studiu analog celui prezentat mai sus conduce la concluzia că în rețeaua respectivă apar unde cu două ramuri distincte ale curbei de dispersie $\omega = \omega(k)$, după cum cele două tipuri de microparticule din structură oscilează în fază (fig. 11.4.3, a) sau în opoziție de fază (fig. 11.4.3, b).

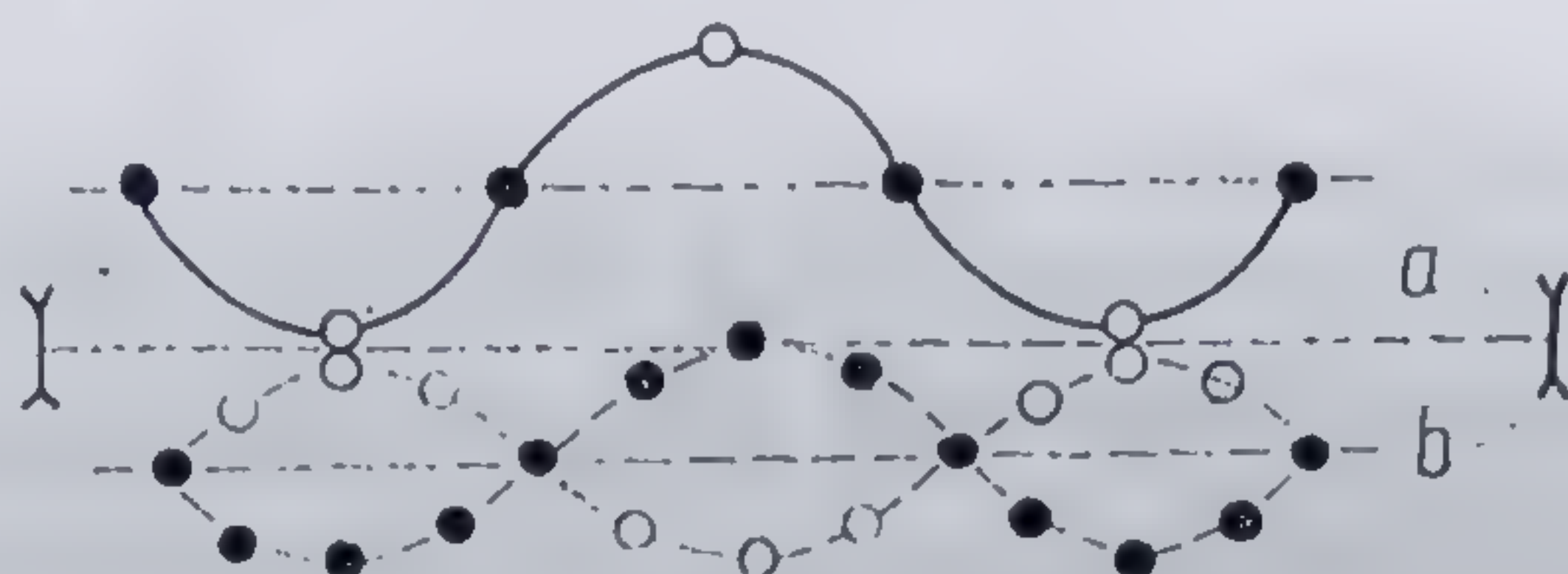


Fig. 11.4.3

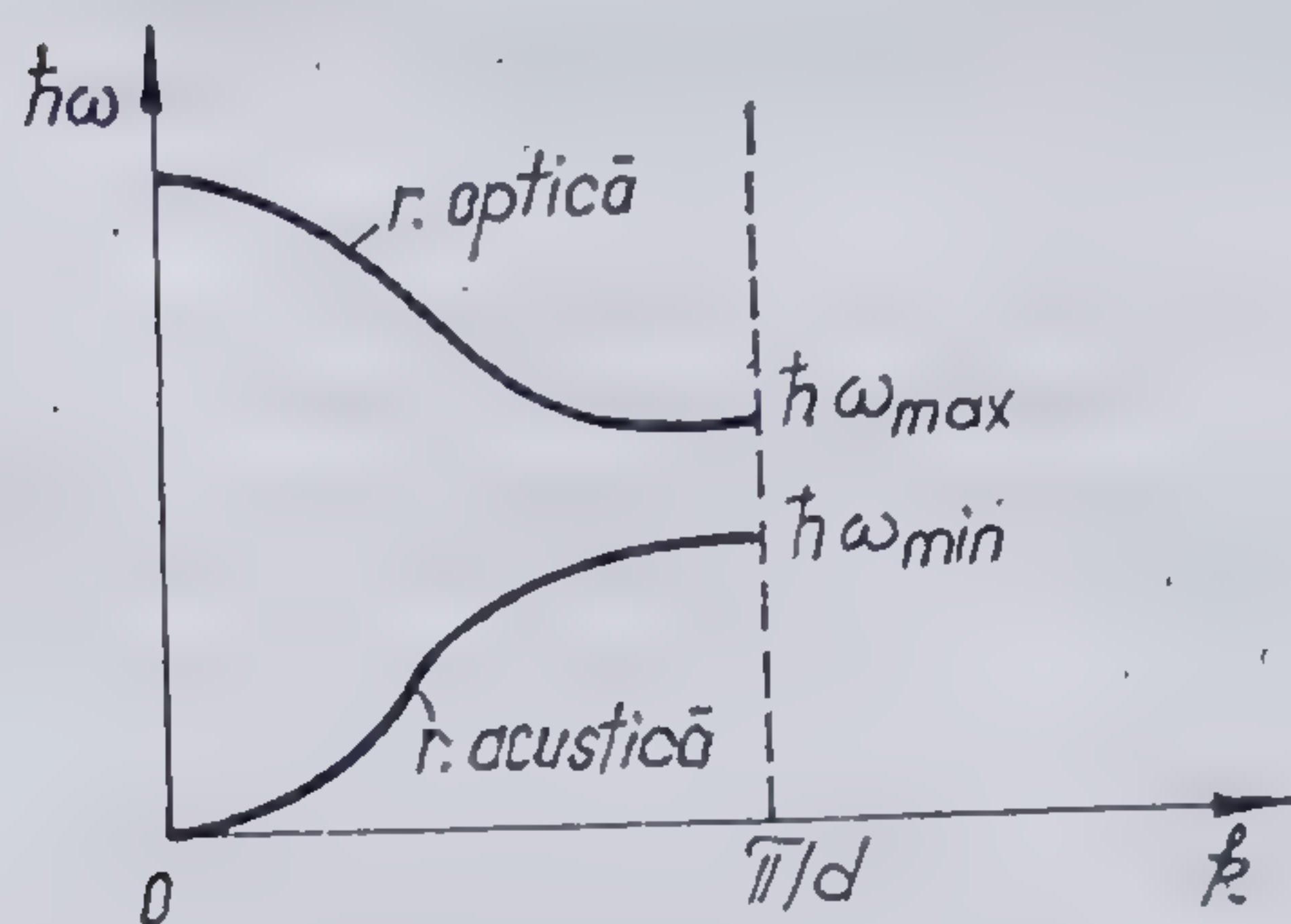


Fig. 11.4.4

În figura 11.4.4 sînt prezentate grafic dependențele $\omega = \omega(k)$ pentru cele două tipuri de undă. Se observă că una dintre ramurile curbei de dispersie este similară celei prezentate anterior în fig. 11.4.1 și

ea se numește *ramură acustică* (deoarece poate avea și frecvențe joase, în limita $k \simeq 0$). Cealaltă se numește *ramură optică* și cuprinde frecvențele înalte, limitate superior și inferior de frecvențele maxime și minime:

$$\nu_{max} = \frac{1}{2\pi} \left[2k_e \left(\frac{1}{m_{p_1}} + \frac{1}{m_{p_2}} \right) \right]^{1/2}; \quad \nu_{min} = \frac{1}{2\pi} \left| \frac{2k_e}{m_{p_1}} \right|^{1/2}. \quad (11.4.12)$$

În ramura optică vibrațiile celor două categorii de microparticule sînt în opoziție de fază și, de aceea, dacă aceste microparticule sînt încărcate cu sarcini electrice de semne diferite (ca în cazul NaCl în care intervin ionii de Cl^- și Na^+), aceste vibrații vor putea fi generate numai prin intermediul cîmpului electric al unei unde luminoase (de unde și denumirea de ramură optică). De notat, în încheiere, că fononii fiind corpusculi cu spin zero vor aparține clasei bosonilor. Ei reprezintă cuantele energetice de schimb ale interacțiilor rețelei cristaline cu alte microparticule din solid și, de aceea, aceste interacții vor putea fi tratate, într-un limbaj cuantic, ca simple ciocniri între respectivele microparticule și fononii rețelei.

10.4.2. PROPRIETĂȚI TERMICE ALE SOLIDULUI

Proprietățile termice sînt prin natura lor proprietăți macroscopice, întrucît ele sînt descrise prin mărimi termodinamice. Aceste mărimi vor putea fi calculate numai dacă se cunosc funcțiile de distribuție statistică ale stărilor microscopice ale sistemului în condiții de echilibru termodinamic. Desigur, pot fi luate în considerație atît distribuții statistice clasice, de tipul celor prezentate în cap. V, cît și distribuții statistice cuantice (vezi cap. IX).

La distribuții cuantice se face apel îndeosebi atunci cînd ne interesează proprietățile termice ale solidului la temperaturi scăzute ($T \rightarrow 0 \text{ K}$), datorită faptului că, așa cum arătam, o dată cu scăderea temperaturii spre 0 K, o parte dintre gradele lui de libertate încep să „înghețe”, proces de care nu se ține seama în distribuțiile statistice clasice.

Din clasa „parametrilor termici de material”, care intervin în descrierea proprietăților termice ale unui corp cristalin, fac parte: a) căldura specifică c , b) coeficientul de dilatare termică α și c) coeficientul de conductibilitate termică κ .

a) *Căldura specifică a unui corp solid* reprezintă, așa cum se știe, căldura necesară unității de masă pentru a-și ridica temperatura cu un grad. Este de asemenea util să definim *căldura kilomolară*, care reprezintă căldura necesară unui kilomol de substanță pentru a-și ridica temperatura cu un grad. La solide, căldura kilomolară se identifică cu căldura kilomolară la volum constant, întrucît se poate neglija variația volumului prin dilatare. Deci

$$c = \frac{1}{v} \left(\frac{\Delta Q}{\Delta T} \right)_v = \frac{1}{v} \frac{\partial U}{\partial T} \quad (11.4.13)$$

unde prin U s-a notat energia internă a sistemului de microparticule care intră în componența solidului.

În §5.4 s-a arătat cum se poate calcula U , pe baza unei legi de distribuție statistică clasică, obținându-se legea Dulong-Petit (5.4.7), adică

$$c = 3R. \quad (11.4.14)$$

Acest rezultat (respectiv $c_p = 3R/\mu$, μ — fiind masa kilomolară) este bine verificat de experiențe la temperaturi obișnuite (fig. 11.4.5), dar

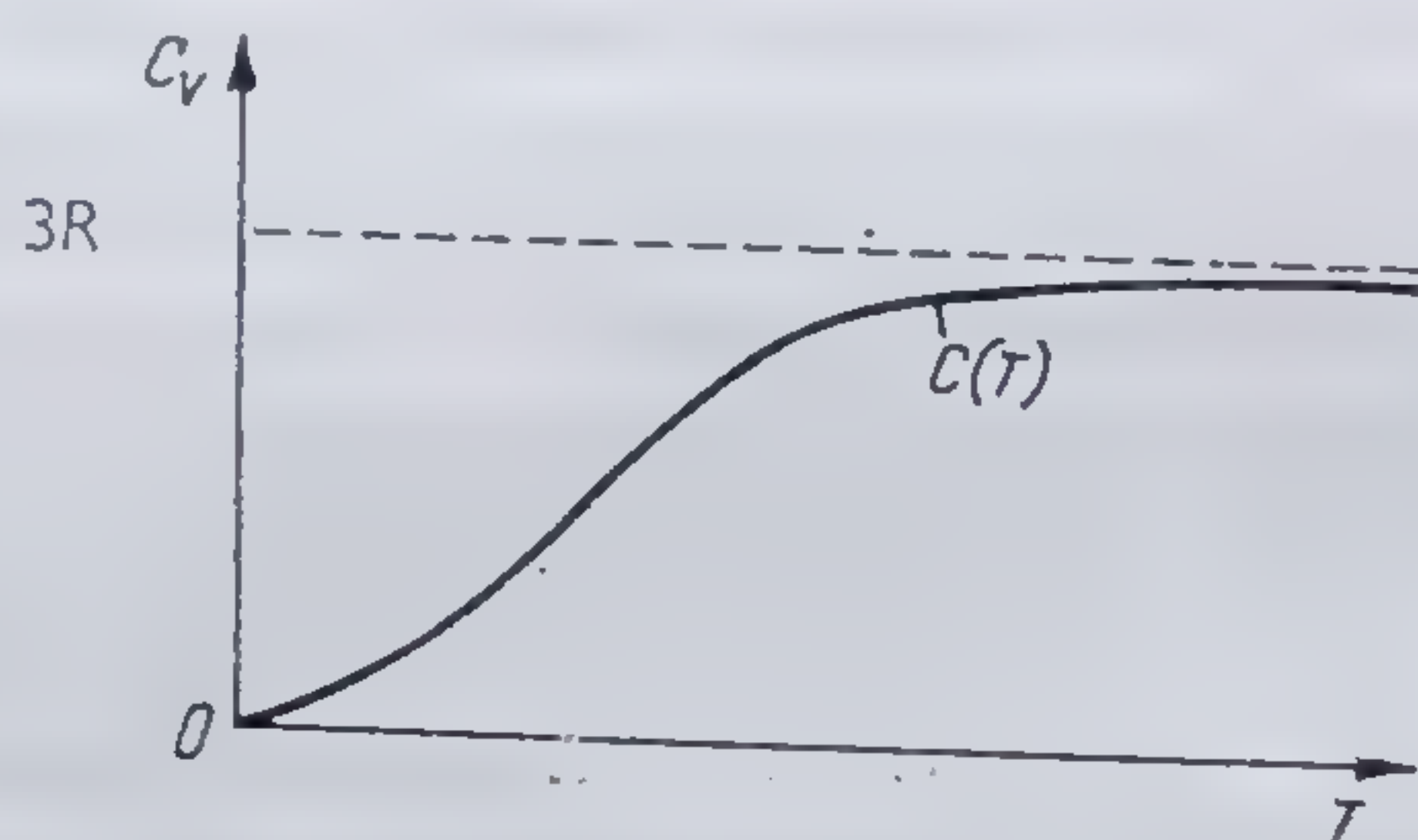


Fig. 11.4.5

la $T \rightarrow 0$ K se constată o scădere a căldurii kilomolare spre zero, după o lege de forma

$$C(T) = \alpha_1 T^3 + \alpha_2 T \quad (11.4.15)$$

în care $\alpha_1 \gg \alpha_2$, iar pentru structuri dielectrice $\alpha_2 \simeq 0$, ceea ce înseamnă că al doilea termen din (11.4.15) se datorește electronilor de conducție.

O lege de forma (11.4.15) a fost obținută de către P. Debye în cadrul unei tratări statistice cuantice, după ce A. Einstein a arătat, în anul 1907, că vibrațiile cuantificate ale rețelei cristaline pot descrie calitativ o astfel de scădere spre zero a căldurii specifice, în apropiere de 0 K, (vezi § 9.3).

În elaborarea teoriei cuantice a căldurilor specifice la solide, Debye pleacă de la faptul că într-o rețea cristalină, în care vibrează microparticulele din nodurile sale, pot să apară mai multe moduri normale de vibrație. În primul rând apar cele două moduri de vibrație optic și acustic, dar în timp ce modul optic conține o singură frecvență de oscilație, în cel acustic pot interveni în succesiune cvasicontinuă o mulțime de frecvențe normale, limitate superior de o frecvență maximă ω_m .

Acestea sînt modurile normale de vibrație, care apar ca urmare a reflexiilor undelor elastice pe fețele cristalului. Admițînd existența distribuției cvasicontinue a acestor moduri de vibrație, cu densitatea spectrală $\rho(\omega)$ și avînd în vedere că cuantele acestor unde, respectiv fononii lor, se supun unei legi de distribuție de tip Bose-Einstein (9.6.1), vom putea scrie

$$U = \int_0^{\omega_m} \frac{\hbar \omega \rho(\omega) d\omega}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} \quad (11.4.16)$$

Prin trecerea de la distribuția $\rho(\omega)$ la distribuția $\rho(k)$, în care $\rho(k)$ reprezintă numărul de stări staționare distincte existența pe unitatea de interval dk din spațiul (k) , atunci cu (8.8.32) se va obține

$$\rho(\omega) d\omega = \rho(k) dk \Rightarrow \rho(\omega) = \rho(k) \frac{dk}{d\omega} = \frac{d\Gamma}{dk} \cdot \frac{dk}{d\omega}$$

sau

$$\rho(\omega) = \frac{N\mathcal{V}_0 k^2 g_i}{2\pi^2} \cdot \frac{d\left(\frac{2\pi}{cT}\right)}{d\omega} = \frac{N\mathcal{V}_0 g_i}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{c^3} \quad (11.4.17)$$

N -fiind numărul de noduri aparținând unei celule elementare, de volum \mathcal{V}_0 , iar c viteza de propagare a respectivei unde elastice. Luând în considerație faptul că în solid iau naștere atât unde longitudinale, care se propagă cu viteza $c_{||}$, cât și unde transversale (din ramura optică), pentru care există două stări de polarizare și a căror viteză de propagare este c_{\perp} , se va obține

$$\rho(\omega) = \frac{\mathcal{V}_0 N c \omega^2}{2\pi^2} \left(\frac{1}{c_{||}^3} + \frac{2}{c_{\perp}^3} \right) \quad (11.4.18)$$

Aici s-a ținut seama de faptul că nivelele de vibrație sînt nedegenerate și prin urmare, $g_i = 1$ (vezi § 8.8.6). Dacă se admite, în continuare, că $c_{||} = c_{\perp}$, iar numărul maxim de moduri normale de vibrație ale rețelei se ia egal cu numărul N de noduri ale acesteia, atunci din

$$\int_0^{\omega_m} \rho(\omega) d\omega = 3N \quad (11.4.19)$$

se găsește

$$\omega_m = \left[\frac{6\pi^2 c^3 N}{\mathcal{V}} \right]^{1/2}; \quad \mathcal{V} = N \mathcal{V}_0 \quad (11.4.20)$$

De exemplu, pentru un corp cristalin, în care $c = 5 \cdot 10^3$ m/s și $N/\mathcal{V} = 10^{29}$ m⁻³, rezultă, $\omega_{max} = 10^{14}$ rad/s. Funcție de această valoare maximă, Debye definește o temperatură T_D , denumită ulterior *temperatură Debye*, prin relația:

$$\hbar \omega_m = k_b T_D. \quad (11.4.21)$$

Reîntorcîndu-ne, cu aceste rezultate, la formula (11.4.16), o putem scrie sub forma:

$$U(T, \mathcal{V}) = \int_0^{\omega_m} \frac{3N\mathcal{V}_0 \hbar^2 \omega^3}{2\pi^2 c^3} \frac{d\omega}{e^{\hbar\omega/k_b T} - 1} \quad (11.4.22)$$

din care, prin introducerea notațiilor

$$x = \frac{\hbar \omega}{k_b T}; \quad x_m = \frac{\hbar \omega_m}{k_b T}, \quad (11.4.23)$$

obținem

$$U(T, \mathcal{V}) = \frac{3\mathcal{V}k_b^4 T^4}{2\pi^2 c^3 h^3} \int_0^{x_m} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}. \quad (11.4.23)$$

Desigur, integrala

$$I(x_m) = \int_0^{x_m} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \quad (11.4.25)$$

va putea fi calculată doar prin metode numerice, funcție de valorile lui x_m , avînd pentru un x_m dat (deci pentru un cristal dat) o valoare finită, constantă. Atunci

$$C(T) = \left(\frac{\partial U(T, \mathcal{V})}{\partial T} \right)_{\mathcal{V}} = \frac{6\mathcal{V}k_b^4 T^3}{\pi^2 c^3 h^3} \cdot I(x_m) = \alpha_1 T^3. \quad (11.4.26)$$

Dacă s-ar extinde integrarea în (11.4.25) pînă la infinit (făcînd $x_m \rightarrow \infty$), atunci s-ar găsi $I(\infty) = \pi^4/15$ și deci pentru $C(T)$ ar rezulta expresia

$$C(T) \simeq 234 N_A k_b \left(\frac{T}{T_0} \right)^3 = \alpha_1 T^3. \quad (11.4.27)$$

O astfel de expresie este destul de bine verificată de datele experimentale pentru structurile dielectrice, fiind cunoscută sub denumirea de *formula lui Debye*.

De notat că în cazul structurilor metalice, la căldura kilomolară a rețelei, calculată mai sus, trebuie să se adauge și contribuția electronilor de conducție. Este vorba de electronii din imediata apropiere a nivelului Fermi E_F și anume de cei ce se găsesc, pentru $T > 0$ K, deasupra acestui nivel. Desigur că se poate estima ușor acest număr N și anume, admițînd că el este cu atît mai mare cu cît este mai ridicată temperatura T a solidului în raport cu temperatura Fermi, $T_F = E_F/k_b$. Atunci, la un kilomol de ioni metalici monovalenți va corespunde un număr

$$N = N_A \frac{T}{T_F} \quad (11.4.28)$$

de electroni de conducție ce se găsesc deasupra nivelului E_F și care posedă o energie internă

$$U_{el}(T) = \frac{3}{2} N k_b T = \frac{3}{2} R \frac{T^2}{T_F} \quad (11.4.29)$$

respectiv o căldură kilomolară

$$C_{el}(T) = \frac{3R}{2T_F} T = \alpha_2 T. \quad (11.4.30)$$

O analiză mai de detaliu conduce la expresia:

$$\alpha_2 = 3 k_b^2 \rho(E) \quad (11.4.31)$$

în care prin $\rho(E)$ s-a desemnat densitatea energetică de stări. Deoarece, potrivit formulei (11.3.54), în expresia lui $\rho(E)$ intră și masa efectivă m^* a electronilor liberi sau evasiliberi din structura cristalină, rezultă că din măsurători de $C_{el}(T)$ în apropiere de 0 K, unde $C_{el}(T) \gg C(T)$ (vezi fig. 11.4.6), se pot obține informații asupra suprafețelor izoenergetice.

b) *Dilatarea termică.* Prin dilatare termică se înțelege variația relativă a dimensiunilor unui corp odată cu variația temperaturii sale. La solide se poate defini un coeficient fenomenologic de dilatare termică liniară α , prin expresia

$$\alpha = \frac{1}{l_0} \frac{\Delta l}{\Delta T}. \quad (11.4.32)$$

Măsurătorile ne arată că α nu variază în mod sensibil cu temperatura pentru variații de temperatură pe domenii nu prea mari, situate în apropierea temperaturii camerei.

Este interesant de observat însă că în cazul rețelelor cristaline, ale căror noduri execută oscilații armonice, fenomenul de dilatare nu intervine.

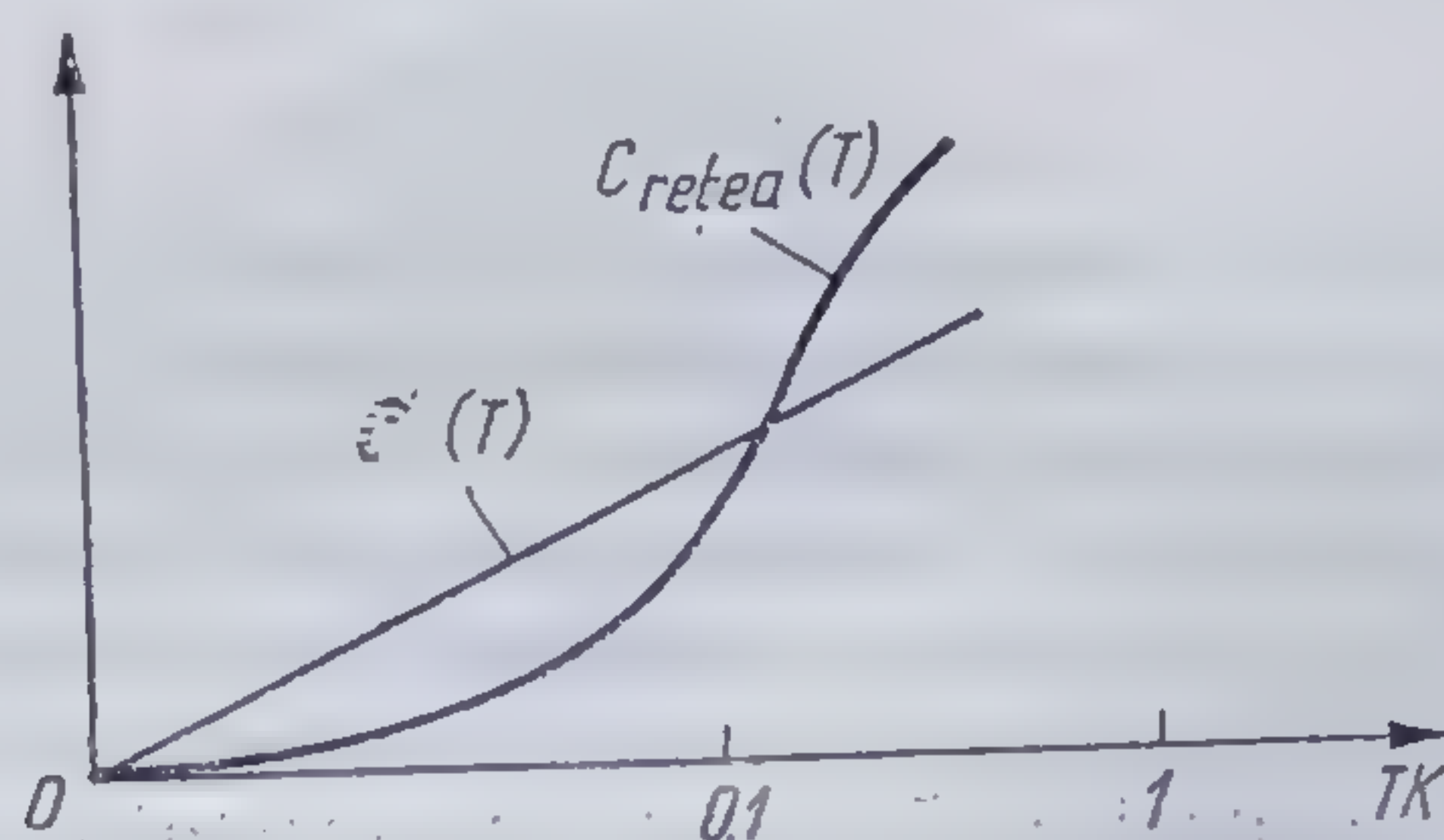


Fig. 11.4.6

Într-adevăr, socotind valoarea medie $\langle x \rangle$ a poziției unui astfel de nod cu ajutorul unei distribuții clasice, în care energia potențială este energia de deformare elastică $V(x) = \frac{1}{2} k_e x^2$, se obține

$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{k_e x^2}{2k_b T}} dx}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{k_e x^2}{2k_b T}} dx} = 0. \quad (11.4.33)$$

În schimb, pentru oscilații anarmonice, în care caz

$$V(x) = \frac{1}{2} k_e x^2 - f x^3, \quad (11.4.34)$$

printr-un calcul analog se găsește

$$\langle x \rangle = \frac{3}{4} \frac{f k_b \cdot T}{k_e^2}. \quad (11.4.35)$$

ceea ce înseamnă că pentru o rețea unidimensională de constantă a , se va obține [30]:

$$\alpha = \frac{1}{a} \frac{\partial \langle \omega \rangle}{\partial T} = \frac{3}{4a} \frac{k_b}{k_c} f \quad (11.4.36)$$

3. *Conducția termică.* Fenomenele de conducție termică sînt fenomene de transport care fac parte din categoria fenomenelor ireversibile. Deci ele nu vor putea fi tratate cu metodele standard ale termodinamicii proceselor reversibile, respectiv ale statisticii, ci numai fenomenologic sau cinetic [68], așa cum s-a menționat în §4.6.

În cazul structurilor metalice purtătorii de energie termică vor fi, în principal, electronii de conducție. De aceea, în legea fenomenologică a lui Fourier (4.6.12), adică în expresia

$$\mathbf{J} = \mathbf{q} = -\kappa \nabla T \quad (11.4.37)$$

coeficientul de conductivitate termică κ va fi determinat de caracteristicile dinamice ale electronilor de conducție. Din teoria cinetico-moleculară se găsește expresia

$$\kappa = \frac{1}{3} c_{el} \langle v \rangle \cdot \langle l \rangle \quad (11.4.38)$$

$\langle v \rangle$ fiind viteza medie a electronilor de conducție, $\langle l \rangle$ liberul parcurs mediu al acestora, iar c_{el} căldura specifică electronică.

Desigur că, în structuri dielectrice, nu electronii, ci fononii vor fi purtătorii de energie termică. Un studiu cuantic conduce la concluzia că în prezența vibrațiilor anarmonice ale rețelei cristaline între fononi pot interveni atât ciocniri bifononice, la care participă doi fononi, cît și ciocniri trifononice, la care participă și rețeaua cristalină. Prin intermediul acestor ciocniri căldura este transferată de la sursa caldă la cea rece.

Pot interveni însă și ciocniri trifononice de tip U (răsturnare), care

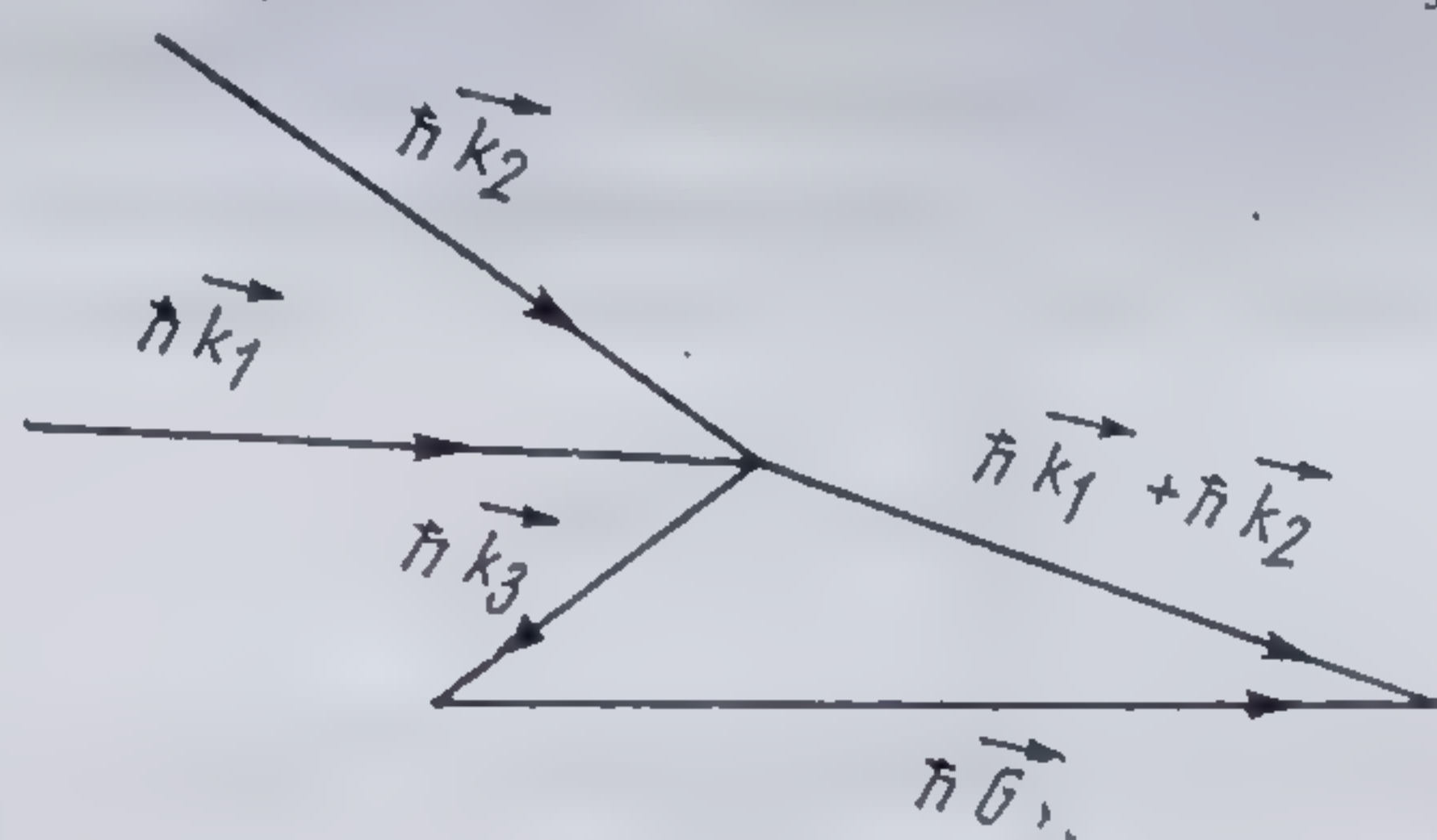


Fig. 11.4.7

se opun procesului de transfer a căldurii și care constituie surse ale rezistenței termice a dielectricului. În figura 11.4.7 este schițată o ciocnire trifononică „cu răsturnare”, în care se constată că legea conservării impulsului cere ca impulsul $\hbar \mathbf{k}_3$ al fononului rezultat din ciocnirea fononilor \mathbf{k}_1 și \mathbf{k}_2 să aibă un sens invers sensului fononilor incidenti, întrucît

$$\hbar \mathbf{k}_1 + \hbar \mathbf{k}_2 = \hbar \mathbf{G} + \hbar \mathbf{k}_3 \quad (11.4.39)$$

\mathbf{G} fiind un vector Miller al rețelei reciproce.

Există și alte procese care își aduc aportul la rezistivitatea termică, cum ar fi difuzia fononilor pe impuritățile de structură sau pe cele de substituție, pe defectele de structură, ciocnirile cu alte microparticule și corpusculi din solid etc., studiul tuturor acestor procese prezentînd un interes deosebit pentru descrierea proprietăților termice ale solidului.

§ 11.5. PROPRIETĂȚI ELECTRICE ALE SOLIDULUI

11.5.1. CONDUCTIBILITATEA ELECTRICĂ A METALELOR. SUPRACONDUCTIBILITATEA

În capitolul VI s-a arătat că există mai mulți parametri de materia în funcție de care se pot descrie proprietățile electrice ale unui solid. De exemplu, proprietățile electrice legate de transportul sarcinilor electrice prin solid sînt descriabile prin intermediul *conductivității electrice* σ , respectiv prin inversul acestei mărimi, $\sigma^{-1} = \rho$, numită *rezistivitate electrică* (vezi și § 6.7.2). În cazul stării solide cristaline, acești parametri vor fi *tensori* de rangul trei, întrucît intervine anizotropia, adică dependența proprietăților fizice de orientarea față de axe cristaline a direcției în lungul căreia se explorează respectivele proprietăți. Dar legat de acest studiu, va trebui să precizăm însăși simetria mărimilor de câmp cu care se descriu acțiunile exterioare asupra solidului. Din acest punct de vedere, intensitatea câmpului electric \mathbf{E} este un *vector polar*. El posedă simetria grupului ∞mm , care conține o axă ∞ , orientată în lungul lui \mathbf{E} , cu un număr infinit de operații de rotație (respectiv, la rotația cu un unghi oricît de mic în jurul lui \mathbf{E} , proprietățile acestui câmp nu se modifică) și o infinitate de plane de reflexie care conțin axa ∞ (lipsește planul de oglindire normal la \mathbf{E}). Prin vectori polari vom putea descrie, de asemenea, densitatea de curent \mathbf{J} (vezi § 6.7.1), vectorul moment dipolar electric \mathbf{p} (6.6.38) și vectorul de polarizare electrică \mathbf{P} (6.6.116).

Și în anumite cristale pot fi întîlnite *direcțiile polare* și anume în acele structuri care nu posedă plane de simetrie de tip n/m , respectiv plane de simetrie perpendiculare la axe de rotație. Din cele 32 grupuri punctuale de simetrie, 10 au axe polare privilegiate și anume: grupurile 1, 2, 3, 4, 6, m , $2mm$, $3m$, $4mm$; $6mm$, care au o singură astfel de axă polară, numită *axă polară privilegiată*; 11 grupuri punctuale sînt polare neutre, deoarece ele nu posedă axe polare privilegiate (ei mai multe axe polare echivalente, și anume grupurile: 222 , $\bar{4}$, $\bar{4}22$; $\bar{4}2m$; $3/2$; $\bar{6}$, 622 ; 23 , $\bar{4}32$, $\bar{4}3m$). Restul de 11 grupuri sînt nepolare ($\bar{1}$, $2/m$; $mm\ m$; $4/m$; $4/mmm$; $\bar{3}$; $\bar{3}m$; $6/m$; $6/m\ m\ m$; $m\ 3$; $m\ 3\ m$).

Este de așteptat ca simetria structurii cristaline să determine o serie de particularități ale mărimilor tensoriale care descriu proprietățile fizice ale solidului. De exemplu, în cazul conducției electrice, prin aplicarea unui câmp electric E_x după o anumită direcție „ x ” din cristal, va lua naștere,

în conformitate cu legea diferențială Ohm (6.7.9), un curent de densitate J_k pe direcția „ k ”, dat de următoarea relație tensorială

$$J_k = \sum_i \sigma_{ik} E_i; (\sigma_{ik}) = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \quad (11.5.1)$$

(σ_{ik}) — fiind *tensorul conductivitate electrică*. El se exprimă printr-o matrice pătratică de rangul al treilea.

Relația (11.5.1) arată că cei doi vectori polari, \mathbf{J} și \mathbf{E} , nu sînt în general paraleli între ei. Se pot însă stabili *trei direcții principale* (funcție de tipul structurii cristaline), în lungul cărora cei doi vectori sînt paraleli între ei. Pentru astfel de direcții, tensorul conductivității electrice (σ_{ik}) se exprimă printr-o matrice cu elementele nenule, situate pe diagonala sa, de forma

$$(\sigma_{ik})_p = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{pmatrix}.$$

Considerații similare pot fi făcute și în privința polarizării dielectrice [13]. La un cîmp E_i , aplicat pe direcția „ i ”, se va naște o stare de polarizare a cărui vector de polarizare (P_k), orientat pe direcția k , va fi descris de *tensorul susceptivitate electrică* (χ_{ik}) , în conformitate cu relația

$$P_k = \varepsilon_0 \sum_i \chi_{ik} E_i; (\chi_{ik}) = \begin{pmatrix} \chi_{11} & \chi_{12} & \chi_{13} \\ \chi_{21} & \chi_{22} & \chi_{23} \\ \chi_{31} & \chi_{32} & \chi_{33} \end{pmatrix} \quad (11.5.2)$$

existînd și în acest caz posibilitatea alegerii unor direcții principale. în raport cu care, (χ_{ik}) , se reduce la formă diagonală:

$$(\chi_{ik})_p = \begin{pmatrix} \chi_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \chi_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{33} \end{pmatrix}.$$

De consemnat că pentru cristalele care posedă o singură axă principală (tetragonale, hexagonale și romboedrice), numite și *cristale uniaxe*, între componentele principale ale tensorilor de material intervin relații de forma

$$\sigma_{11} = \sigma_{22} \neq \sigma_{33}; \chi_{11} = \chi_{22} \neq \chi_{33}$$

axa $i = k = 3$, fiind o axă paralelă cu axa principală. Așa, de exemplu, în cazul spatului de Islanda (§ 7.7), (un cristal de calcit CaCO_3 , cristalizat în sistemul romboedric, care posedă grupul de simetrie $\bar{3}m$), axa pentru care $i = k = 3$ este tocmai axa $\bar{3}$. Această axă, posedînd un centru de inversie ($\bar{3} = \hat{I}3$), nu va fi o axă polară, ci o axă *optică principală* a spatului. În schimb, în cazul cristalelor cubice avem $\sigma_{11} = \sigma_{22} = \sigma_{33} = \sigma$, în lungul celor trei muchii ale cubului.

Prin luarea în considerație a elementelor de simetrie ale structurii cristaline se poate dezvolta o tratare, atît clasică, cît și cuantică, a proprie-

tăților electrice ale solidului. Rezultatele la care conduc teoriile clasice sînt expuse în § 6.6. și § 6.7. Teoriile cuantice nu modifică sensibil aceste rezultate, ele aducînd contribuții doar în explicitarea timpilor de relaxare τ , care descriu mecanismele de transfer energetic dintre electronii de conducție și rețeaua cristalină, sau a mecanismelor de polarizare spontană în feroelectrici [25, 57, 66, 105].

Într-adevăr, întrucît la metale nivelul fermi E_F se găsește în interiorul unei benzi permise, toate stările fundamentale ale electronilor de conducție vor fi degenerate, găsindu-se, la $T = 0$ K, în interiorul suprafețelor sferice, pentru care

$$E(k_F) = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}. \quad (11.5.3)$$

În condiții de echilibru termodinamic, la temperatura T , popularea nivelelor energetice se va face în conformitate cu legea de distribuție Fermi-Dirac (9.4.30). Prezența cîmpului electric extern E nu modifică mult această distribuție. În prima aproximație putem admite că sub acțiunea lui E , distribuția sferică $E(k_F)$ se deplasează în sens invers cîmpului electric E .

Din legea de mișcare

$$\hbar \frac{dk}{dt} = -eE$$

se calculează valoarea acestei deplasări pentru un interval de timp Δt , egal cu timpul de relaxare τ

$$\Delta k = -\frac{e\tau}{\hbar} E.$$

Dar: $\hbar \Delta k = m^* v_k$ și deci:

$$\mathbf{J} = n_0 e v_k = \frac{n_0 e^2 \tau}{m^*} \mathbf{E} \quad (11.5.4)$$

pentru $\sigma = \mathbf{J}/E$, rezultînd o expresie similară celei (6.7.49), cu deosebirea că masa de repaus a electronului este înlocuită cu masa lui efectivă. Dacă cîmpul E perturbă mai serios distribuția Fermi-Dirac, dar în așa fel încît aproximația timpului de relaxare să fie încă valabilă, atunci calculele pot fi făcute astfel: din cunoașterea suprafețelor izoenergetice $E = E(k)$ ale primei zone Brillouin se determină vitezele electronice de drift* (vezi § 6.7) în starea staționară, cu ajutorul expresiei

$$\mathbf{v}_k = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(k). \quad (11.5.5)$$

Atunci, densitatea de curent de conducție va fi dată de

$$\mathbf{J} = -e \int \mathbf{v}_k \rho(E_k) p_{FD} dE_k$$

* Mișcarea de drift (sau mișcarea „în rol de albine“) este o mișcare haotică, peste care se suprapune o mișcare ordonată într-o anumită direcție.

relație, care cu (8.8.31) și (8.8.32) ia forma

$$\mathbf{J} = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int \mathbf{v}_k p'_{FD}(\mathbf{k}) d\mathbf{v}_k \quad (11.5.6)$$

factorul 2 apărînd datorită degenerării de spin ($g_s = 2s + 1 = 2$). Aici

$$p'_{FD}(\mathbf{k}) = p_{FD}(\mathbf{k}) - p_{FD}^{(0)}(\mathbf{k})$$

iar :

$$p_{FD}^{(0)}(\mathbf{k}) = [e^{\frac{E_k - E_F}{k_B T}} + 1]^{-1}$$

Dar, în aproximația timpului de relaxare τ_k se poate scrie

$$\frac{1}{\hbar} \nabla_k p_{FD}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{\tau_k} [p_{FD}(\mathbf{k}) - p_{FD}^{(0)}(\mathbf{k})]$$

unde

$$\frac{1}{\hbar} \nabla_k p_{FD}^{(0)}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial p_{FD}^{(0)}(\mathbf{k})}{\partial E(\mathbf{k})} \nabla_k E(\mathbf{k}) = \mathbf{v}_k \frac{\partial p_{FD}^{(0)}(\mathbf{k})}{\partial E(\mathbf{k})}$$

Luînd

$$\mathbf{F} = e\mathbf{E}; \quad \mathbf{J} = \sigma\mathbf{E}$$

prin calcule simple [57] se obține

$$\sigma = \frac{e^2}{12\pi^2 \hbar} \int |\mathbf{v}_k| \tau_k dS$$

rezultat care permite calcularea lui σ , dacă se cunoaște viteza de drift v_k și timpul de relaxare τ_k . Nu vom face calcule de detaliu, ci ne vom limita, în continuare, doar la prezentarea cîtorva probleme de bază ale fenomenului de *supraconductibilitate*. În paragraful următor va fi expusă teoria conducției electrice a semiconductoarelor.

În § 6.7.2 s-a menționat că supraconductibilitatea a fost descoperită în anul 1911 de către Kamerling și Onnes. El constată că componenta fonică ρ_T (vezi 6.7.51) a Hg scade brusc la zero sub o temperatură critică $T_c \simeq 4,15$ K (fig. 11.5.1). Ulterior s-a demonstrat experimental că pentru majoritatea metalelor, aliajelor și compuşilor intermetalici există o temperatură critică c, T sub care $\rho_T = 0$. Acest fenomen a primit numele de supraconductibilitate.

Date fiind multiplele avantaje ce se obțin din folosirea în practică a acestui fenomen, el a fost intens studiat în ultimii ani atît sub aspect teoretic, cît și experimental. S-a constatat că temperatura critică variază de la o substanță la alta, cele mai ridicate valori întîlnindu-se la compuşii

Substanța	In	Sn	Hg	Ta	V	Pb	Nb	GeTe	SrT ₄ O ₃	NbAlCu	Nb Ge
T_c, K	3,39	3,72	4,15	4,48	5,30	7,18	9,40	20,05	20,1	21	23,3

intermetalici pe bază de niobiu. S-a constatat, de asemenea, că în starea de supraconductibilitate, liniile unui câmp magnetic \vec{B} sînt expulzate din corp (fig. 11.5.2), fenomen cunoscut sub numele de *efect Meissner*.

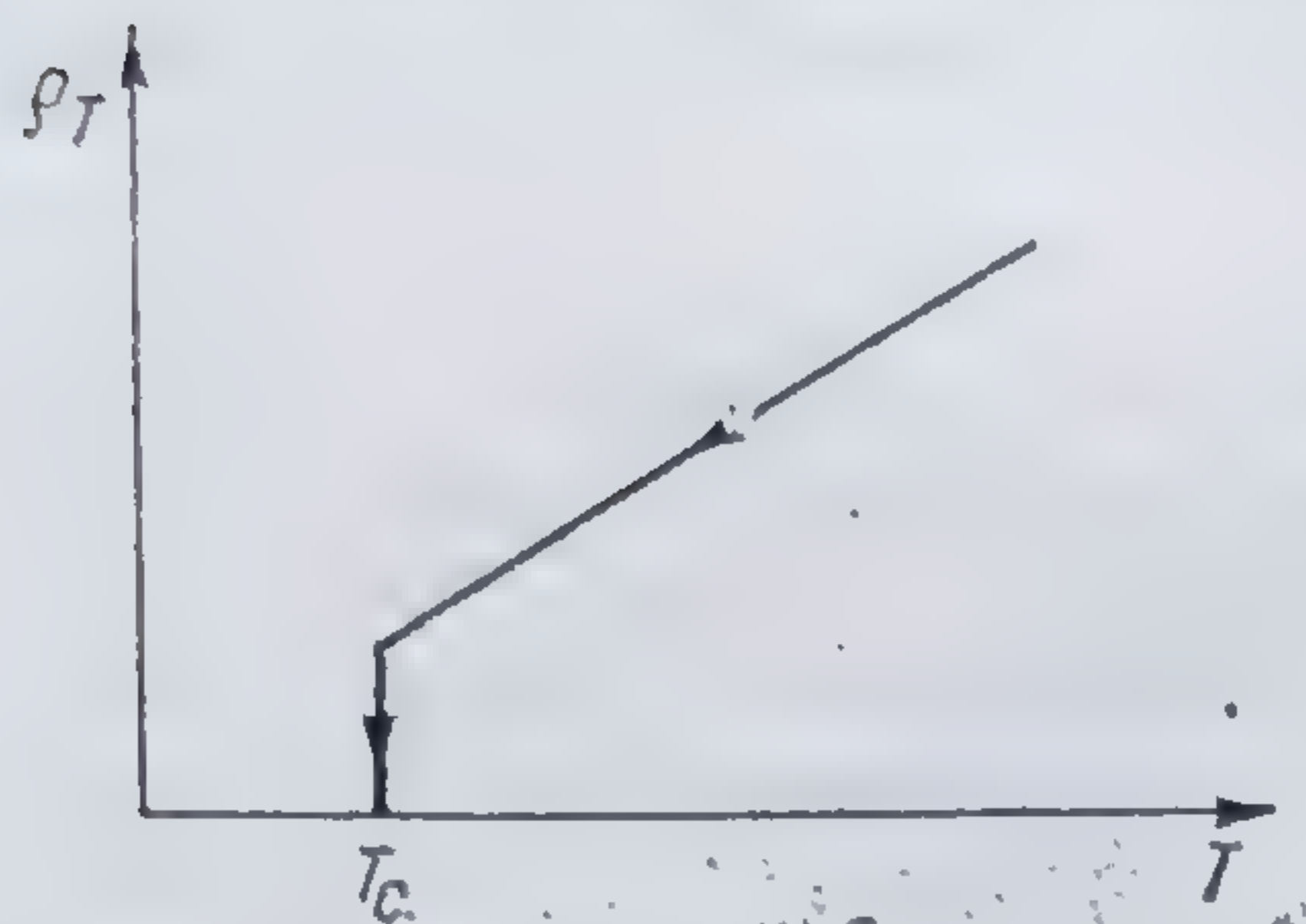


Fig. 11.5.1

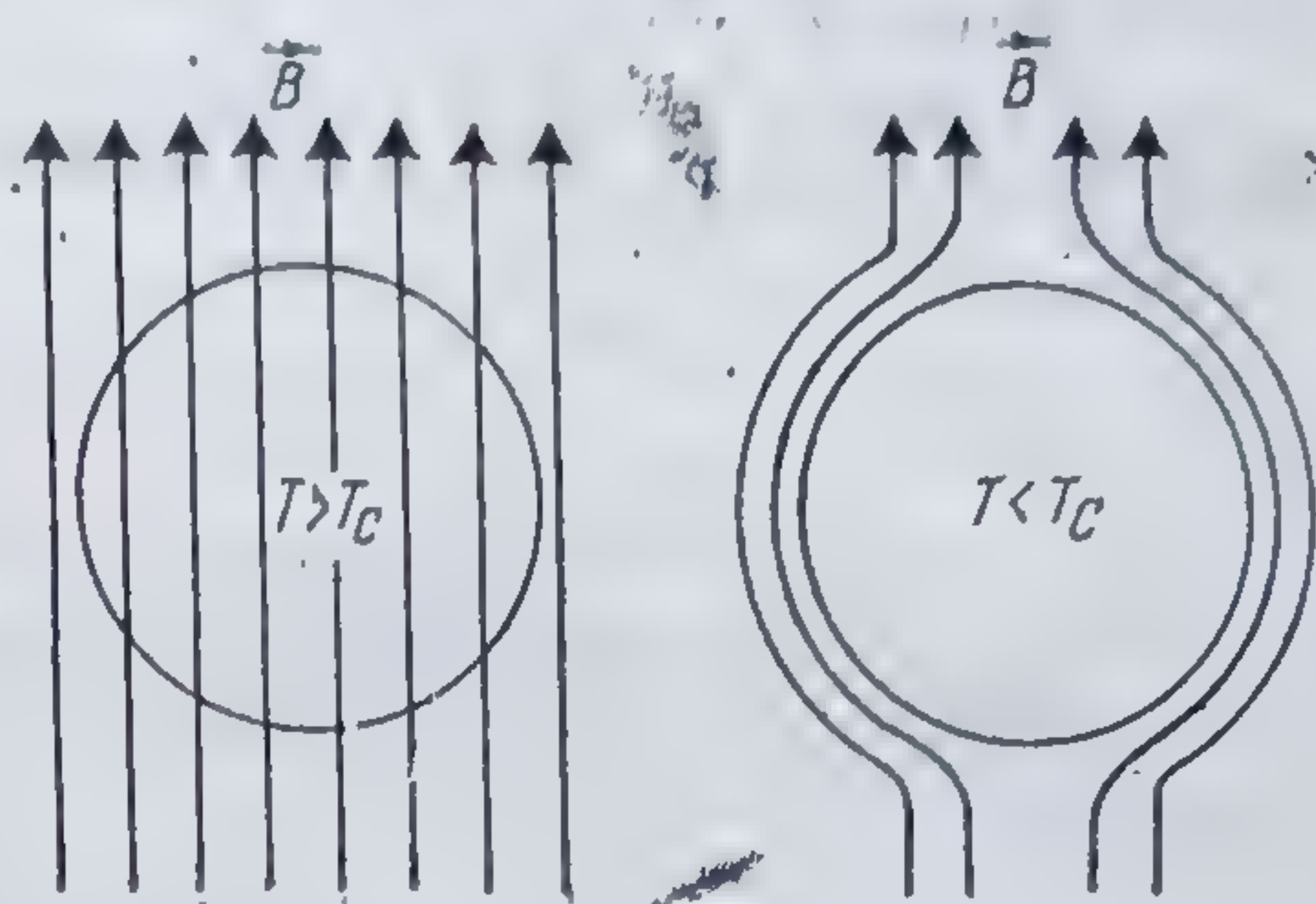


Fig. 11.5.2

Prin urmare, în starea supraconductoare corpurile manifestă proprietăți diamagnetice ($\chi_m = -1$, vezi § 11.6). Pentru câmpul magnetic cu inducția B , ce depășește o anumită valoare critică B_c , fenomenul de supraconductibilitate dispare; în tabelul de mai jos sînt trecute astfel de valori critice, pentru cîteva substanțe:

Substanța	Aliaj PbBi	Nb	Ta	Nb ₃ Zr	V ₃ Ga	Nb ₃ Sn	NbTi
$B_c(T)$	1,5	0,195	8,2	10	10	20	10

Toate aceste proprietăți ale supraconductoarelor le fac utilizabile în domenii ca :

- obținerea unor câmpuri magnetice de inducții ridicate ($B = 1 \div 20$ T), cu bobine supraconductoare, realizate din sîrmă de Nb sau Nb₃Sn;
- realizarea unor ecranări magnetice prin efect Meissner (pînă la $B_{min} \approx 10^{-6}T$);
- realizarea unor redresori de curent alternativ, fără contacte, care prin variația inducției B (peste sau sub valoarea critică B_c) permit sau nu trecerea curentului electric;
- obținerea unor rezonatori (de tipul cavităților rezonante) cu factori înalți de calitate;
- realizarea detectorilor de tip bolometric pentru radiații infraroșii, de mare sensibilitate;
- realizarea unor instrumente de măsură (galvanometre) foarte sensibile;
- reducerea pierderilor prin efect Joule în circuitele electrice;
- realizarea unor sisteme de memorie pentru mașini electronice de calcul bazate pe criotroane supraconductoare [70] etc.

Desigur că toate aceste aplicații sînt condiționate de realizarea unor temperaturi scăzute, care deocamdată se obțin numai cu ajutorul heliu-

lui lichid, în condiții de cost relativ ridicat. Din această pricină, cercetările teoretice și-au îndreptat atenția nu numai spre explicarea fenomenului, ci și a mecanismelor prin care s-ar putea ridica valoarea temperaturii de tranziție T_c din starea normală în starea supraconductoare.

Un prim succes în explicarea mecanismului de supraconducție s-a înregistrat în anul 1957, când Bardeen, Cooper și Schriffer reușese să ela-

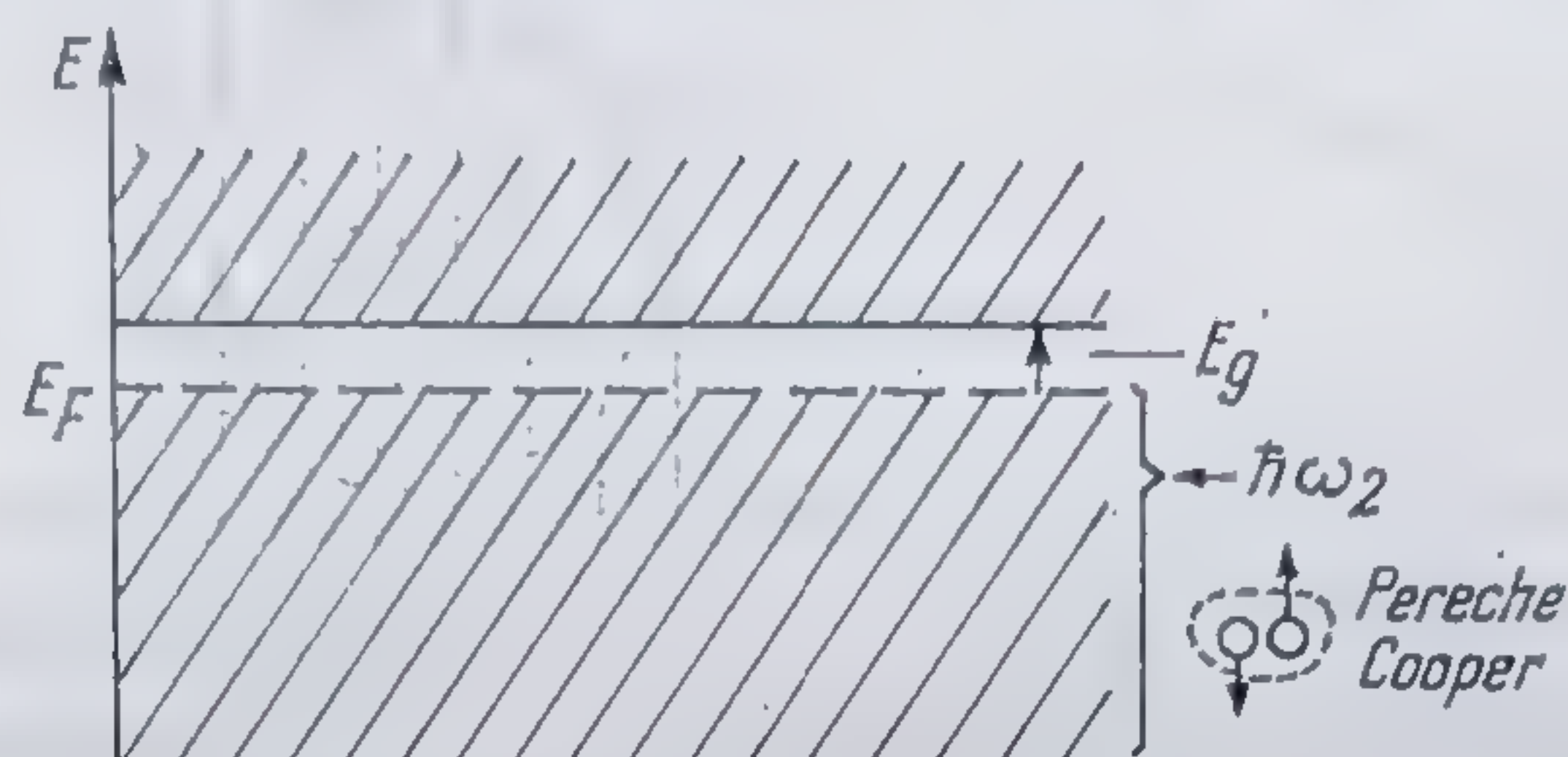


Fig. 11.5.3

boreze o teorie cuantică a fenomenului de supraconductibilitate. Această teorie se bazează pe ideea „perechilor Cooper“, realizate din electroni de conducție cuplați cu spinii inversați (antiparaleli), prin intermediul fononilor virtuali ai rețelei cristaline. Astfel de stări legate, deși posedă o energie de legătură de numai 10^{-8} eV (evaluată din faptul că printr-un cîmp critic B_c , de energie $1/2 B_c N_c \simeq 10^{-8}$ eV, starea supraconductoare poate fi distrusă), sînt puternic corelate între ele și se situează, din punct de vedere energetic, într-o zonă îngustă, de lărgime egală cu energia $\hbar\omega_q$ a fononului de legătură, în imediata apropiere a nivelului Fermi (fig. 11.5.3). Aceste stări sînt separate de stările permise, situate deasupra lui E_F , printr-o bandă interzisă de lărgime E_g (ca și în cazul semiconductoarelor §11.6).

Teoretic, se ajunge la concluzia că

$$E_g \simeq 4k_b T_c.$$

Prezența acestei benzi interzise a fost pusă în evidență și pe cale experimentală, prin absorbție în infraroșu, obținîndu-se o absorbție selectivă a radiației cu frecvența $\nu = E_g/h$.

Rezultă, din cele consemnate mai sus, că în stare supraconductoare electronii de conducție ai metalului, cuplîndu-se doi cîte doi în perechi Cooper, vor participa la o mișcare colectivă coerentă în prezența unor cîmpuri exterioare. În această mișcare perechile de electroni se comportă ca veritabili bosoni cu spin zero, iar interacția cu rețeaua, în sensul unui transfer de energie de la cîmpul exterior la rețea prin intermediul ciocnirilor electron-rețea încetează, ciocnirile transferînd în acest caz prin intermediul fononilor energia numai în interiorul sistemului de electroni cuplați. Acest fapt conduce la anularea componentei fononice ρ_T a rezistivității electrice.

În cadrul teoriei Bardeen-Cooper-Schriffer (B C S) se găsește că temperatura de tranziție T_c este determinată de lărgimea benzii interzise

E_g și de un factor adimensional g (ale cărui valori sînt cuprinse între $1/3$ și $1/4$), conform relației :

$$T_c = 0 \text{ e}^{-1/g} = T_D \text{ e}^{-1/g} \quad (11.5.8)$$

În această expresie, T_D este temperatura Debye, definită prin (11.4.21), dacă cuplajul este de tip fononic. Avînd în vedere că în general T_D este cuprins între $10^2 - 10^3$ K, rezultă din (11.5.8) că temperatura de tranziție T_c nu poate depăși o valoare maximă de 40 K, dacă electronii sînt cuplați în perechi prin interacții de tip fononic. De aceea, studiile mai recente [39] au fost îndreptate și spre alte mecanisme care pot realiza cuplaje între electronii de conducție din structurile metalice, o atenție deosebită acordîndu-se studiului cuplajelor prin *polaroni* (excitații cuantificate în dielectrice), *magnoni* (excitații cuantificate în sisteme de spini ordonați, vezi § 11.6), *excitoni* (stări excitate electron-gol) etc. De exemplu, în cazul unui mecanism de cuplare prin excitoni s-a găsit $g=1/4-1/5$ și $\theta = 10^3 - 10^5$ K, valori care conduc, potrivit relației (11.5.8), la valori ridicate pentru temperatura de trecere în starea supraconductoare T_c (apropiate de temperatura camerei, $T_c \approx 300$ K).

Pentru stimularea mecanismelor de cuplare de tip excitonic s-au folosit mai multe căi experimentale, una dintre ele utilizînd straturi subțiri metalice, realizate în structuri de tip sandwich (fig. 11.5.4, a), inter-

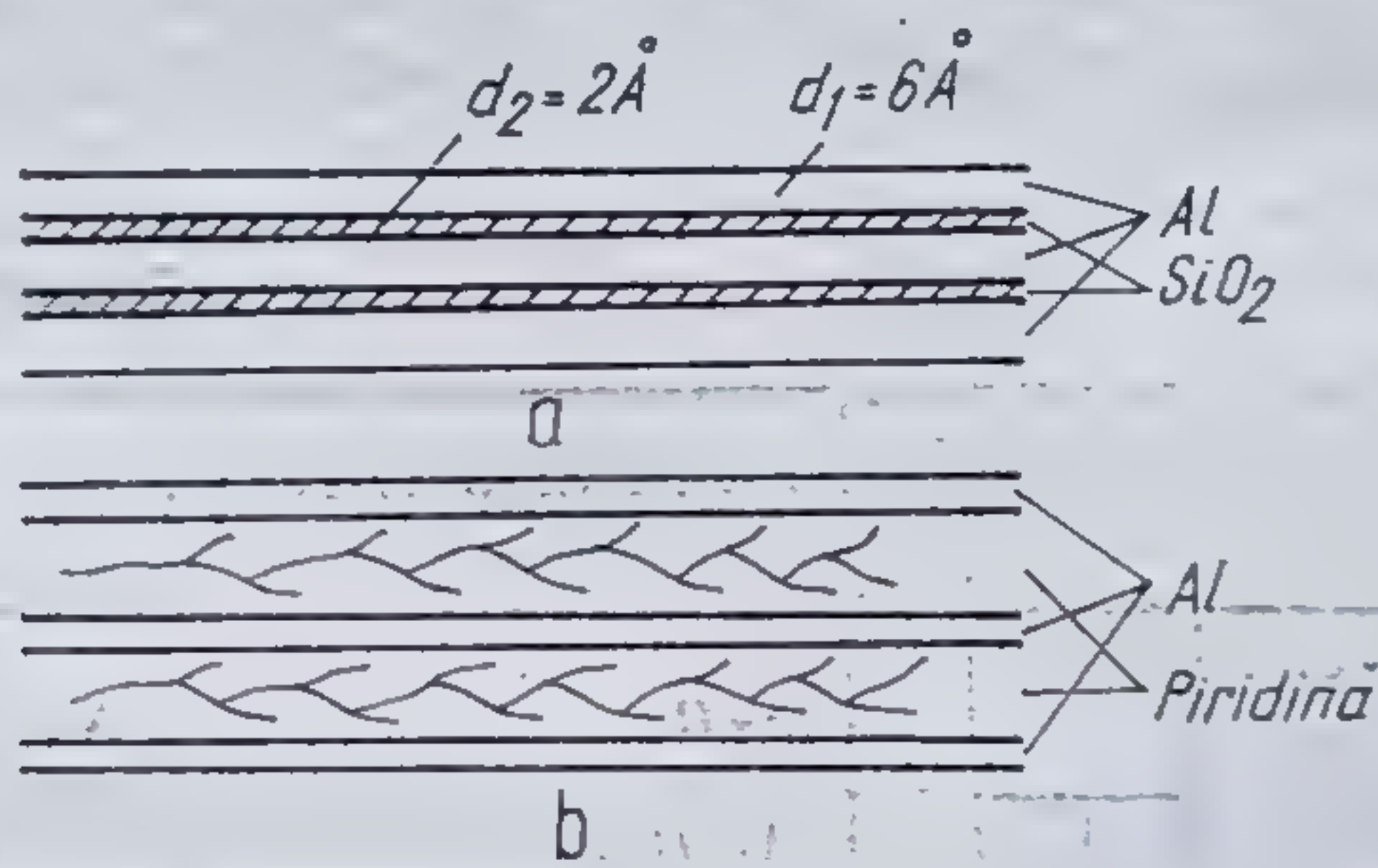


Fig. 11.5.4

calate cu straturi subțiri de oxizi. Experimental s-a obținut o creștere a valorilor lui T_c pentru astfel de straturi în comparație cu valorile lui T_c pentru respectivele metale în stare masivă.

De asemenea, au fost obținute creșteri ale lui T_c prin realizarea unor structuri sandwich în care stratele subțiri metalice sînt intercalate cu straturi subțiri de polimeri (fig. 11.5.4, b). Se stimulează astfel apariția unor polaroni la capetele lanțurilor de polimeri care sînt ordonate preferențial spre stratele metalice. Dar creșterile lui T_c obținute pînă în prezent nu sînt spectaculoase, cea mai ridicată valoare înregistrată fiind, $T_c = 23$ K, pentru compusul NbGe. De aceea, supraconductibilitatea rămîne încă un domeniu deschis, de mare interes pentru studii teoretice și practice.

11.5.2. CONDUCTIBILITATEA ELECTRICĂ A SEMICONDUCTOARELOR

În § 11.4.4 s-a arătat că una din caracteristicile semiconductoarelor o reprezintă prezența benzii de valență (BV), care la 0 K este complet populată cu electroni și a celei de conducție (BC), complet liberă (vezi fig. 11.3.10,b), separată de prima cu mai puțin de 3 eV. Dar astăzi se cunosc și semiconductoare în stare amorfă, situația prezentată mai sus referindu-se numai la semiconductoarele din starea cristalină, așa încât caracteristicile generale (macroscopice) ale unui semiconductor sînt, de fapt, următoarele :

- sensibilitate fotorezistivă,
- rezistivitate cuprinsă între cea a metalelor ($\rho = 10^{-8} \Omega \cdot m$ și a dielectricilor ($\rho = 10^{12} \Omega \cdot m$) și variație neliniară a rezistivității cu temperatura,
- sensibilitate ridicată a proprietăților electrice (îndeosebi a celor legate de conducție) față de anumite impurități de substituție, chiar și la concentrații extrem de mici ale acestora.

Gama substanțelor care în fază condensată manifestă proprietăți semiconductoare este extrem de vastă. În tabelul 11.5.1 sînt trecute elementele pure, care în stare solidă manifestă proprietăți semiconductoare (cele mai utilizare practic fiind Ge și Si), iar în tabelul 11.5.2, cîteva din combinațiile binare și ternare cu proprietăți semiconductoare de interes practic.

Tabelul 11.5.1

B	C			
	Si	P	S	I
	Ge	As	Se	
	Sn	Sb	Te	

Tabelul 11.5.2

Combinații	Reprezentanți
$A_{\text{I}}B_{\text{VI}}$	Ag Cl; Cu Br; K Br
$A_{\text{II}}B_{\text{VI}}$	Cd S; Cd Se; Cd Te; ZnS
$A_{\text{III}}B_{\text{V}}$	Antimoniți, arseniți
Combinații ternare	Ga As P; In Ga Sb

a) *Conductibilitatea intrinsecă a semiconductoarelor.* Acest tip de conductibilitate este specific semiconductoarelor pure (Si, Ge) și apare ca urmare a salturilor electronilor, situați la limita superioară a benzii de valență, în banda de conducție, la orice $T > 0$ K (fig. 11.5.5). Vor rezulta astfel două tipuri de purtători liberi de sarcină electrică și anume, *electronii* în banda de conducție și *golurile* (care se comportă ca purtători de sarcină pozitivă) în banda de valență.

Caracteristicile energetice ale acestor două tipuri de purtători de sarcină, respectiv dependențele de vectorul de undă k ale energiei lor sînt destul de complexe, fiind de forma celor reprezentate în figura 11.3.9. Forma elipsoidală a suprafețelor izoenergetice în spațiul (k) determină,

pentru cele două tipuri de purtători de sarcină din semiconductor, mase efective diferite ($m_e^* \neq m_g^*$), ale căror valori depind și de direcția în raport cu axele cristaline după care are loc conducția (vezi § 11.3.3). De aceea, coeficientul de conductibilitate electrică σ va avea valori diferite pentru

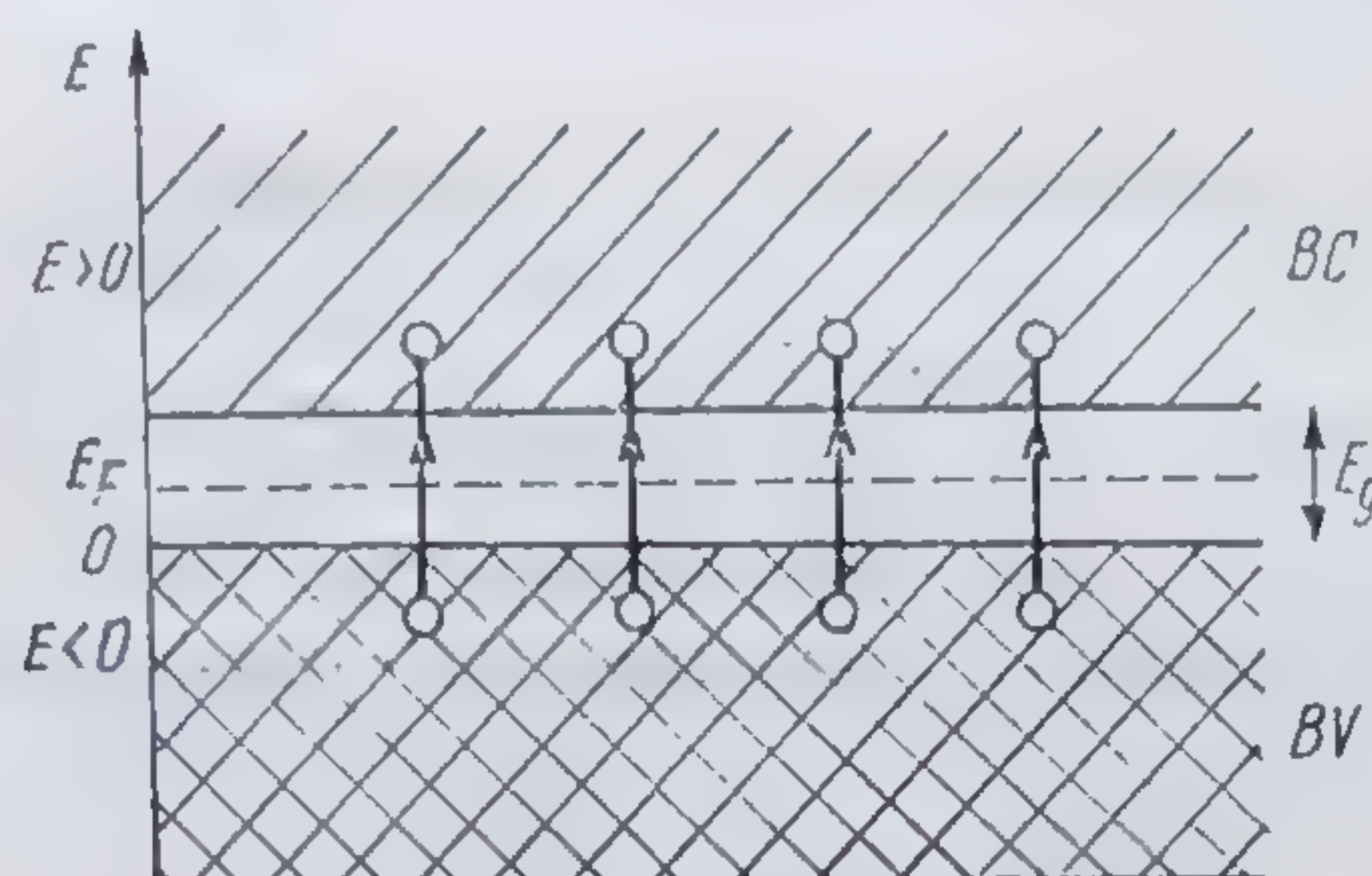


Fig. 11.5.5

electroni, respectiv pentru goluri și va fi, totodată, o mărime tensorială [55, 86, 91].

În conformitate cu (6.7.49) se va putea scrie

$$\sigma_{ik} = \frac{n_e e^2 \tau_e}{(m_e^*)_{ik}} + \frac{n_g e^2 \tau_g}{(m_g^*)_{ik}} \quad (11.5.7)$$

în care τ_e și τ_g reprezintă timpii de relaxare ai ciocnirilor electronilor, respectiv a golurilor, iar prin n_e și n_g s-a notat numărul acestor purtători de sarcină din unitatea de volum. În condiții de echilibru termodinamic la temperatura T , avînd în vedere distribuția subnivelelor energetice cu densitatea $\rho(E)$ în cadrul unei benzi permise și popularea acestor subnivele cu o probabilitate p_{FD} dată de legea de distribuție Fermi-Dirac (9.5.15) vom obține

$$n_e = n_- = \int_{E_g}^{\infty} \rho(E) p_{FD}^e(E) dE; \quad n_g = n_+ = \int_{-\infty}^0 \rho(E) p_{FD}^g(E) dE \quad (11.5.8)$$

Aici, limita inferioară a benzii de valență a fost extinsă la $-\infty$, iar limita superioară a benzii de conducție, la $+\infty$, fără a modifica mult valorile lui n_e și n_g , deoarece avem în vedere cu preponderență golurile situate la limita superioară a benzii de valență și electronii situați la limita inferioară a benzii de conducție.

Dacă, la metale, gazul electronic este un gaz total degenerat (întrucît $E_F \simeq 3 - 5$ eV și pentru $T = 300$ K, $k_b T = 0,03$ eV astfel încît $k_b T \ll E_F$, toate stările fiind degenerate), la semiconductori și semimetale, $E > E_F$ și deci, $(E - E_F)/k_b T \gg 1$, astfel că se pot face aproximațiile :

$$p_{FD}^e(E) = \frac{2}{e^{\frac{E-E_F}{k_b T}} + 1} \simeq 2e^{-\frac{E-E_F}{k_b T}}; \quad p_{FD}^g(E) = 1 - p_{FD}^e(E) \simeq 2e^{\frac{E_F-E}{k_b T}} \quad (11.5.9)$$

În același timp, utilizând pentru $\rho(T)$ o expresie simplă, de forma (11.3.54), după câteva calcule elementare, din (11.5.8), se va obține

$$n_e = \frac{2(2\pi m_e^* k_b T)^{3/2}}{h^3} \cdot e^{-\frac{E_g - E_F}{k_b T}}; \quad n_g = \frac{2(2\pi m_g^* k_b T)^{3/2}}{h^3} \cdot e^{-\frac{E_F}{k_b T}} \quad (11.5.10)$$

Numărul electronilor fiind egal cu al golurilor, putem scrie

$$n_e = n_g = \frac{2(2\pi k_b T)^{3/2}}{h^3} (m_e^* \cdot m_g^*)^{3/2} \cdot e^{-\frac{E_g}{2k_b T}} \quad (11.5.11)$$

rezultat care înlocuit în (11.5.7) conduce la o expresie de forma

$$\sigma(T) = \sigma_0 e^{-\frac{E_g}{2k_b T}} \quad (11.5.12)$$

(în care, dependența în $T^{3/2}$ din σ_0 poate fi neglijată în comparație cu dependența exponențială de T).

De remarcat că o lege de forma (11.5.12) pune în evidență un coeficient negativ de variație termică a rezistivității. Într-adevăr

$$\alpha_R = \frac{1}{\rho_0} \frac{d\rho}{dT} = -\frac{E_g}{2k_b T^2} e^{-\frac{E_g}{2k_b T}} < 0. \quad (11.5.13)$$

Dispozitivele semiconductoare cu conducție intrinsecă ce dau o utilizare acestor proprietăți poartă denumirea de *termistoare*. Aceste dispozitive sînt utilizate de tehnica electronică, în calitate de elemente cu rezistență negativă sau de senzori de temperatură (îndeosebi termistorii realizați din oxizi ai elementelor de tranziție [81]).

Din dependența de temperatură a rezistivității unui termistor se determină energia E_g , numită adesea și *energie de activare* a conductibilității intrinseci a semiconductorului.

b) *Conductibilitatea extrinsecă a semiconductoarelor*: Acest tip de conductibilitate se realizează în semiconductoare dopate cu anumite tipuri de impurități de substituție, care au calitatea de a modifica în mod sensibil densitatea purtătorilor liberi de sarcină din semiconductor.

Impuritățile donoare sporesc numărul de electroni liberi din semiconductor. În rețeaua Ge sau Si ele sînt constituite din elemente pentavalente (As, Sb, P etc.), care participă la legăturile covalente doar cu 4 din cei 5 electroni de valență pe care îi posedă (fig. 11.5.6. a), cel de al 5-lea electron „e” rămînînd slab legat de ionul de impuritate, localizat într-un nod al rețelei. Slăbirea legăturii acestui electron cu nucleul de As se datorește faptului că rețeaua semiconductorului are o constantă dielectrică de ϵ , ori mai mare decît a vidului ($\epsilon_{rGe} = 16$ și $\epsilon_{rSi} = 12$), ceea ce determină o creștere a razelor primei orbite Bohr, la $r_{Ge} = 54 \text{ \AA}$ și respectiv $r_{Si} = 23 \text{ \AA}$ și o scădere corespunzătoare a energiei de legătură. Va crește în același timp și energia totală E_D a acestor electroni, în așa fel încît nivelele E_D se vor situa în cadrul benzii interzise în imediata apropiere a limitei infe-

rioare a benzii de conducție (fig. 11.5.7), păstrându-și caracterul de nivele atomice. De pe aceste nivele, numite *nivele donoare*, la echilibru termic, un număr N_D de electroni (ce se poate calcula printr-un raționament similar celui folosit în calcularea lui n_c , punînd $\rho(E) = 1$) vor trece ușor în banda

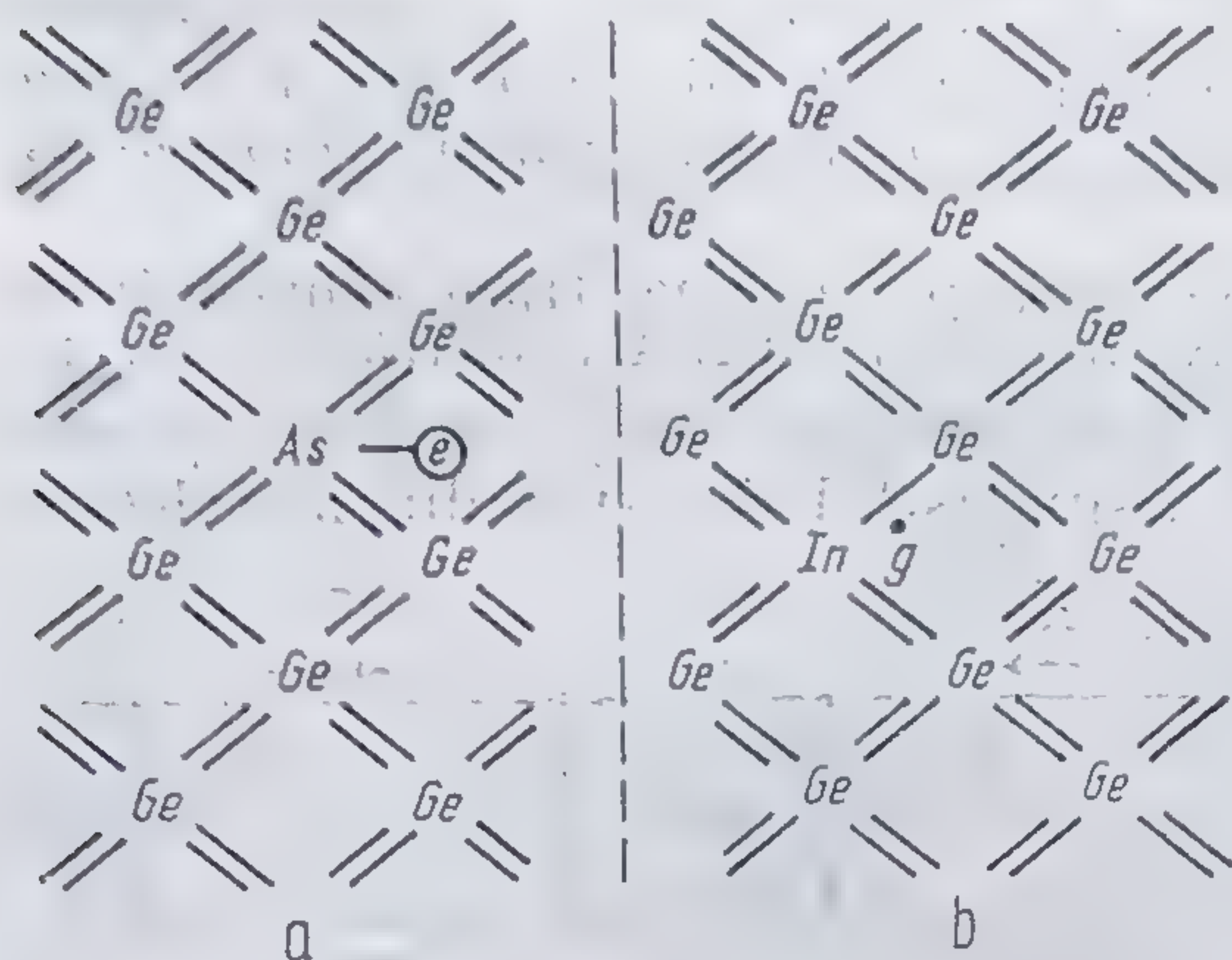


Fig. 11.5.6.

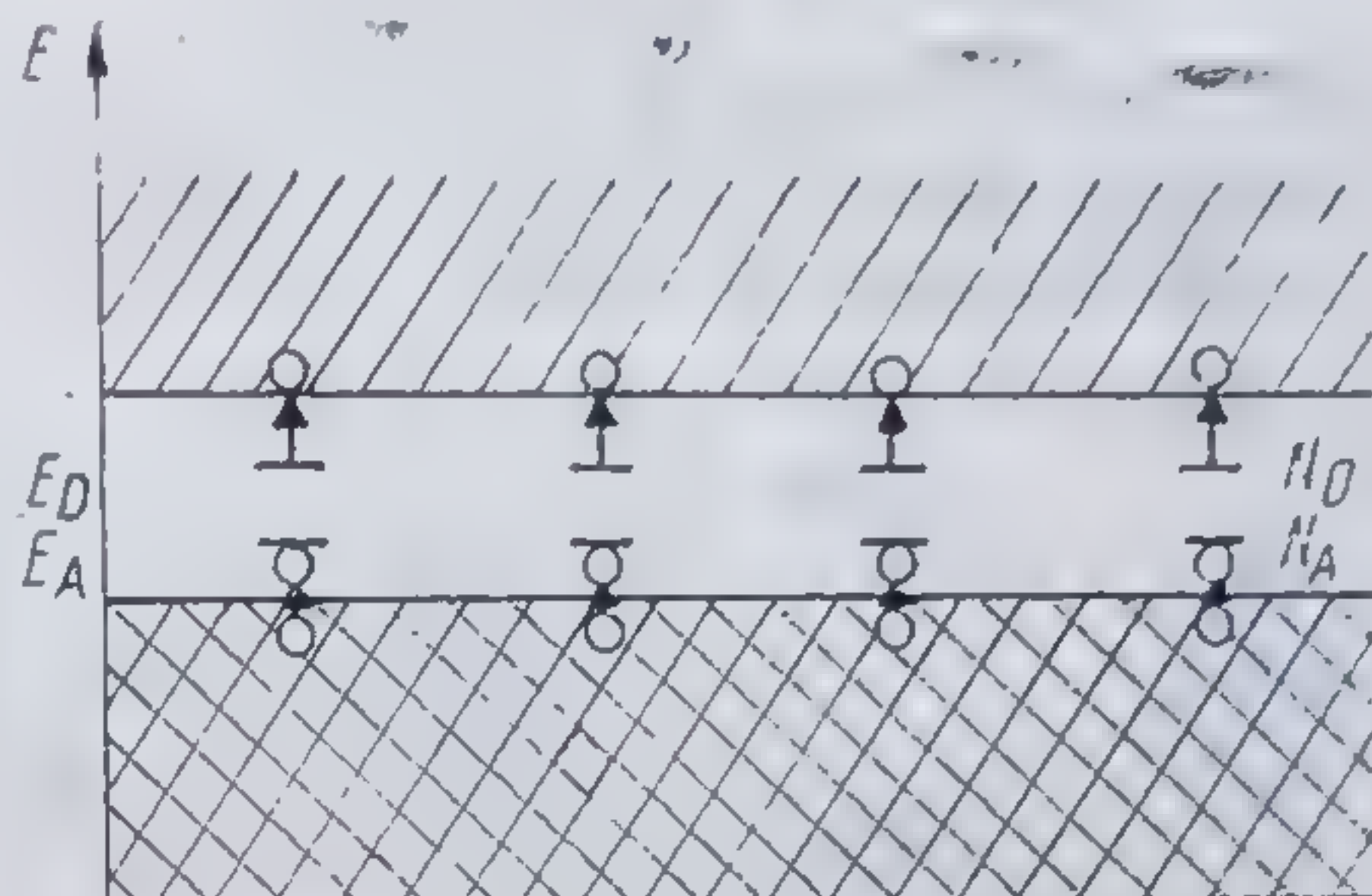


Fig. 11.5.7.

de conducție (BC), obținîndu-se un semiconductor cu purtători majoritari de sarcină negativă (electronii de conducție), denumit *semiconductor de tip n*.

În mod analog, dacă semiconductorul este dopat cu impurități trivalente (Al, Ga, In, Te), în banda de valență vor apărea goluri, adică vor lipsi electroni în sistemul legăturilor covalente, așa cum se indică în fig. 11.5.6,b, golul g putînd migra de la un nod la altul a rețelei și deci comportîndu-se ca un purtător de sarcină electrică pozitivă. Aceste goluri apar ca urmare a populării cu electroni din banda de valență a *nivelelor de energie acceptoare* E_A , situate în imediata apropiere a limitei superioare a acesteia (fig. 11.5.7). Se obțin, astfel, *semiconductoare de tip p*, în care purtătorii liberi de sarcină electrică sînt golurile.

Dacă în același cristal semiconductor se realizează un dopaj, într-o parte a sa cu impurități donoare, iar în cealaltă parte cu impurități acceptoare (fig. 11.5.8), asigurîndu-se controlul riguros al acestui dopaj în așa

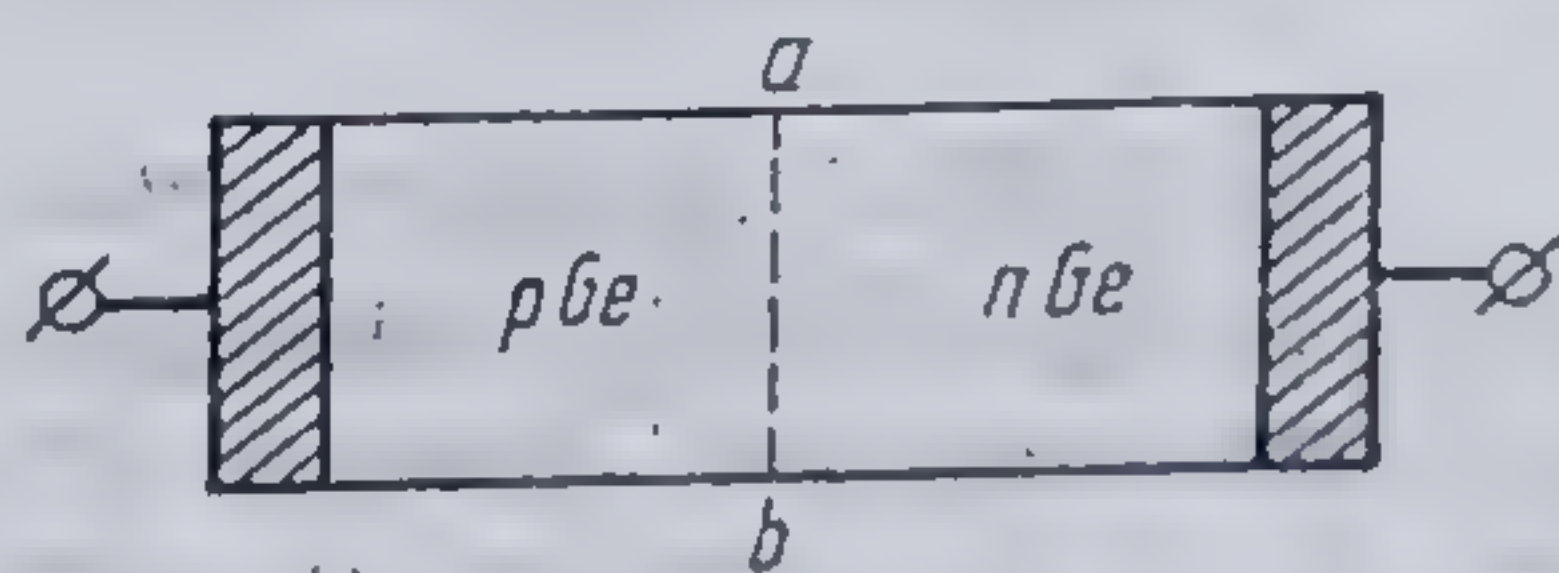


Fig. 11.5.8

fel încît cele două tipuri de impurități din cristal să fie separate între ele printr-un strat ab , atunci acest strat va manifesta proprietăți electrice deosebite. El a primit denumirea de *joncțiune p-n*.

Într-adevăr, se constată ușor că deși în zona p a semiconductorului predomină golurile, iar în zona n electronii de conducție (ca purtători liberi de sarcină), semiconductorul este (la nivel global) neutru din punct de vedere electric în ambele zone (datorită prezenței sarcinilor electrice ale ionilor de impurități donoare sau acceptoare, de semne contrare față de cele ale purtătorilor liberi de sarcină). La realizarea contactului termic între cele două zone ale semiconductorului, electronii de conducție majoritari din zona n vor difuza spontan în zona p , iar golurile din zona p vor migra analog în zona n .

Datorită acestor procese, joncțiunea $p-n$ se va transforma într-un strat polarizat electric (fig. 11.5.9,a), deoarece el se va încărca cu sarcini electrice pozitive înspre zona n și cu sarcini negative înspre zona p (așa cum se ilustrează în figura 11.5.9). Într-un astfel de strat dipolar electric

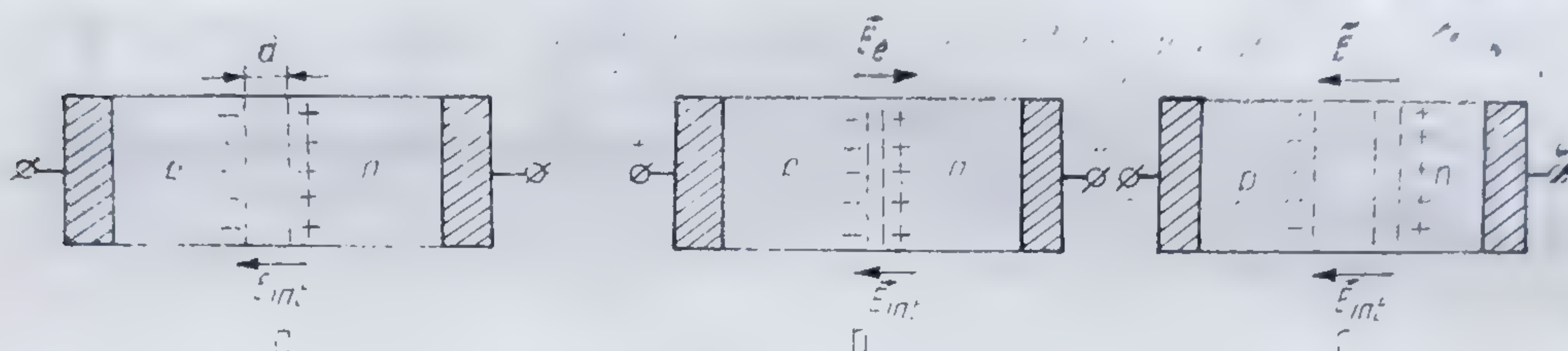


Fig. 11.5.9

se creează un câmp electrostatic, orientat întotdeauna dinspre zona n spre zona p , câmp care la un anumit moment va stopa difuzia termică a electronilor din n în p și a golurilor din p în n .

De remarcat, de asemenea, că sub acțiunea câmpului electric intern E_{int} , sarcinile pozitive din joncțiune se îndepărtează de cele negative, pe o anumită distanță d , în așa fel încât joncțiunea $p-n$ este realizată de un strat dipolar electric de o anumită grosime d , sărăcit în purtători liberi de sarcină. Acest strat va cuprinde o anumită grosime d_1 din zona n și respectiv o anumită grosime d_2 din zona p , regiuni din care purtătorii liberi de sarcină (electronii și golurile) au migrat prin difuzie. Desigur că în aceste două porțiuni ale joncțiunii $p-n$ vor rămâne sarcini volumice legate, și anume sarcinile electrice necompensate ale ionilor de amestec, pozitive din zona n și negative din zona p . Densitățile lor volumice ρ_+ și ρ_- pot fi considerate constante pe cele două porțiuni de grosimi d_1 și d_2 ale stratului ce constituie joncțiunea $p-n$, și în acest caz vor fi date de expresiile

$$\rho_+ = en_e; \quad \rho_- = -en_g \quad (11.5.14)$$

unde prin n_e și n_g s-au notat densitățile volumice ale electronilor și respectiv ale golurilor din semiconductor, date de (11.5.10).

Sarcinile volumice ρ_+ și ρ_- creează în zona stratului de trecere $p-n$ un potențial electrostatic $\phi(x)$, în conformitate cu ecuațiile Poisson (6.4.17; 6.6.7).

$$\frac{d^2\phi_1}{dx^2} = -\frac{\rho_+}{\epsilon} = -\frac{en_e}{\epsilon}; \quad \frac{d^2\phi_2}{dx^2} = -\frac{\rho_-}{\epsilon} = \frac{en_g}{\epsilon} \quad (11.5.15)$$

Pentru găsirea soluțiilor acestor ecuații vom admite condiții la limită de forma

$$\varphi_1(x) = 0; \quad \frac{d\varphi_1}{dx} = 0; \quad \text{pentru } x \geq d_1 \quad (11.5.16)$$

$$\varphi_2(x) = \varphi_0; \quad \frac{d\varphi_2}{dx} = 0; \quad \text{pentru } x \leq -d_1.$$

Prin calcule simple rezultă

$$d\left(\frac{d\varphi_1}{dx}\right) = -\frac{en_e}{\varepsilon} dx$$

$$\int_{\frac{d\varphi_1}{dx}}^0 d\left(\frac{d\varphi_1}{dx}\right) = -\frac{d\varphi_1}{dx} = -\int_x^{d_1} \frac{en_e}{\varepsilon} dx$$

$$\frac{d\varphi_1}{dx} = \frac{en_e}{\varepsilon} (d_1 - x).$$

Integrând în continuare această ultimă expresie, obținem

$$\int_{\varphi_1(x)}^0 d\varphi_1 = \frac{en_e}{\varepsilon} \int_x^{d_1} (d_1 - x) dx$$

$$\varphi_1(x) = -\frac{en_e}{2\varepsilon} (d_1 - x)^2. \quad (11.5.17)$$

În mod analog, din cea de a doua ecuație (11.5.15), rezultă

$$\varphi_2(x) = \varphi_0 + \frac{en_e}{2\varepsilon} (d_2 + x)^2. \quad (11.5.18)$$

Se observă că din condiția de continuitate

$$\frac{d\varphi_1(0)}{dx} = \frac{d\varphi_2(0)}{dx} \quad (11.5.19)$$

se obține egalitatea

$$n_e d_1 = n_o d_2 \quad (11.5.20)$$

iar din condiția

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0) \quad (11.5.21)$$

rezultă

$$\varphi_0 = - \left(\frac{en_e}{2\varepsilon} d_1^2 + \frac{en_g}{2\varepsilon} d_2^2 \right). \quad (11.5.22)$$

Cu transformările :

$$d = d_1 + d_2; \quad \frac{d}{d_1} = 1 + \frac{d_2}{d_1} = 1 + \frac{n_e}{n_g}; \quad \frac{d}{d_2} = 1 + \frac{n_g}{n_e}$$

expresia (11.5.22) poate fi scrisă sub forma :

$$\varphi_0 = - \frac{e}{2\varepsilon} \frac{n_e n_g}{n_e + n_g} d^2 \quad (11.5.23)$$

Acest rezultat pune în evidență faptul că grosimea stratului de baraj d al joncțiunii este determinat de saltul energetic E_0 al benzilor energetice din zona n și zona p , salt exprimat prin (vezi fig. 11.5.11) :

$$E_0 = -e\varphi_0. \quad (11.5.24)$$

fiind dată de expresia :

$$d = \left[\frac{2\varepsilon E_0}{e^2} \left(\frac{1}{n_e} + \frac{1}{n_g} \right) \right]^{1/2}. \quad (11.5.25)$$

La o polarizare directă a joncțiunii, cînd se aplică zonei n un potențial pozitiv φ_I , iar zonei p un potențial negativ φ_{II} , energia benzilor din cele două zone se va modifica cu valoarea

$$\Delta E = -e(\varphi_I - \varphi_{II}) = -e\Delta\varphi \quad (11.5.26)$$

și, prin urmare, grosimea stratului de tranziție $p-n$ se va reduce la o valoare d_I , dată de expresia

$$d_I = \left[\frac{2\varepsilon (E_0 - \Delta E)}{e^2} \left(\frac{1}{n_e} + \frac{1}{n_g} \right) \right]^{1/2}. \quad (11.5.27)$$

În schimb, la o polarizare inversă, grosimea stratului dipolar va crește la o valoare d_{II} , dată de expresia

$$d_{II} = \left[\frac{2\varepsilon (E_0 + \Delta E)}{e^2} \left(\frac{1}{n_e} + \frac{1}{n_g} \right) \right]^{1/2}. \quad (11.5.28)$$

În mod corespunzător se va modifica și rezistența electrică a stratului dipolar al joncțiunii $p-n$, și anume această mărime va crește la o polarizare inversă și se va micșora la o polarizare directă. Înseamnă că prin aplicarea unui câmp electric extern, E_{ext} , rezistența electrică a joncțiunii $p-n$ va crește cînd $E_{ext} \uparrow \uparrow E_{int}$ (fig. 11.5.10c), ca urmare a creșterii grosimii d a stratului lipsit de purtători liberi de sarcină electrică și se va micșora

dacă $E_{ext} \uparrow E_{int}$ (fig. 11.5.10b), micșorându-se și grosimea d a acestui strat. O astfel de comportare conferă joncțiunii $p-n$ funcția de supapă electrică numai dacă se asigură o polaritate convenabilă și anume polaritatea schițată în figura 11.5.10b, numită *polarizare directă a joncțiunii*.

Funcția de redresare a joncțiunii $p-n$ constituie proprietatea esențială a semiconductoarelor cu conductibilitate extrinsecă. Această proprietate le face utilizabile ca dispozitive semiconductoare în tehnica electronică și este demn de menționat aici că numai după descoperirea acestei calități (în anii 1930—1940) materialele semiconductoare au început să revoluționeze tehnica electronică, deși primul semiconductor (sulfura de argint Ag_2S) a fost descoperit și studiat cu peste 100 de ani mai înainte (de Faraday în anul 1834).

Dispozitive semiconductoare. Primele dispozitive semiconductoare au apărut în perioada anilor 1920 — 1922, când oxidul cupros (Cu_2O) și sulfura de plumb (PbS) au început să fie folosite în detecția undelor radioelectrice (așa numita detecție „cu galenă”). Explicarea mecanismului de conducție a semiconductoarelor s-a făcut pe baza teoriilor cuantice mult mai târziu, prin anii 1934 — 1940 (în anul 1934 apare teoria benzilor energetice (§ 11.3) în solid, pe baza modelului creat de Kroning și Penney (§8.85); în anul 1935, C. Zener introduce ideia tunelării interzonale (§8.8.4), și abia în 1940 este demonstrată echivalența dintre benzile energetice și barierele de potențial). În anul 1948, Shockly și Bardeen descoperă principiul de funcționare al *tranzistorului* (așa numitul tranzistor cu contacte punctiforme [55], iar în perioada 1950—1952 apar primele diode semiconductoare cu joncțiuni $p-n$, apoi tranzistorii cu două joncțiuni polarizate invers ($n-p-n$) sau ($p-n-p$) și diodele Zener. Se explică mecanismul de conducție prin avalanșă [79], prin efect tunel (§ 8.8.4), iar începînd cu anul 1957 apar dispozitive semiconductoare pe bază de $InSb$, $GaAs$, $InAs$, $PbTe$, $GaSb$, se descoperă rezistențele negative de tip MOM și MOS (metal-oxid-metal, respectiv metal-oxid-semiconductor), în anii 1962—1964 tehnica semiconductoarelor impunînd o adevărată revoluție în electronică. Se inventează apoi tehnica circuitelor integrate (§ 11.10) și a microprocesoarelor [29]. Fără a intra în detalii de ordin tehnic (vezi [29, 55, 91]), vom prezenta succint în continuare, cîteva dintre principalele dispozitive semiconductoare.

1. *Dioda semiconductoare* este un dispozitiv care conține o singură joncțiune $p-n$, cu rol de redresor pentru curenți alternativi. Calitativ, acest rol a fost explicat mai sus și anume, la o *polarizare directă a joncțiunii* $p-n$, cînd se aplică zonei „ p ” un potențial pozitiv, iar zonei n , unul negativ. ($E_{ext} \uparrow E_{int}$; vezi fig. 11.5.9b) joncțiunea $p-n$ va permite trecerea curentului, iar la o *polarizare inversă* ($E_{ext} \uparrow \uparrow E_{int}$), trecerea va fi mult îngreunată sau chiar interzisă. În fig. 11.5.10, a este reprezentată caracteristica volt-amperică specifică unui redresor cu joncțiune $p-n$, iar în fig. 11.5.10, b sînt schițate benzile de energie în porțiunea respectivei joncțiuni. Luînd în considerație faptul că la echilibru termic numerele

de electroni n_c și de goluri n_g sînt cele date de relațiile (11.5.10), rezultă pentru curentul electric dinspre zona p spre zona n , o expresie de forma

$$I_1 = Ae^{-E/k_bT} \quad (11.5.29)$$

Pentru curentul în sens invers (de la n la p), se obține

$$I_2 = Ae^{-\frac{(E-E_F)}{k_bT}} \cdot e^{-\frac{(E-E_g+E_F)}{k_bT}} \quad (11.5.30)$$

al doilea factor din această expresie reprezentînd probabilitatea ca un electron din zona n să poată escalada bariera de potențial, de înălțime $E - E_g - E_F$ (vezi fig. 11.5.9,b) pentru a trece în zona p .

Dacă se aplică joncțiunii $p-n$ o tensiune electrică $+U$ (care polarizează invers joncțiunea, cînd $U > 0$ și direct, cînd $U < 0$), atunci înălțimea

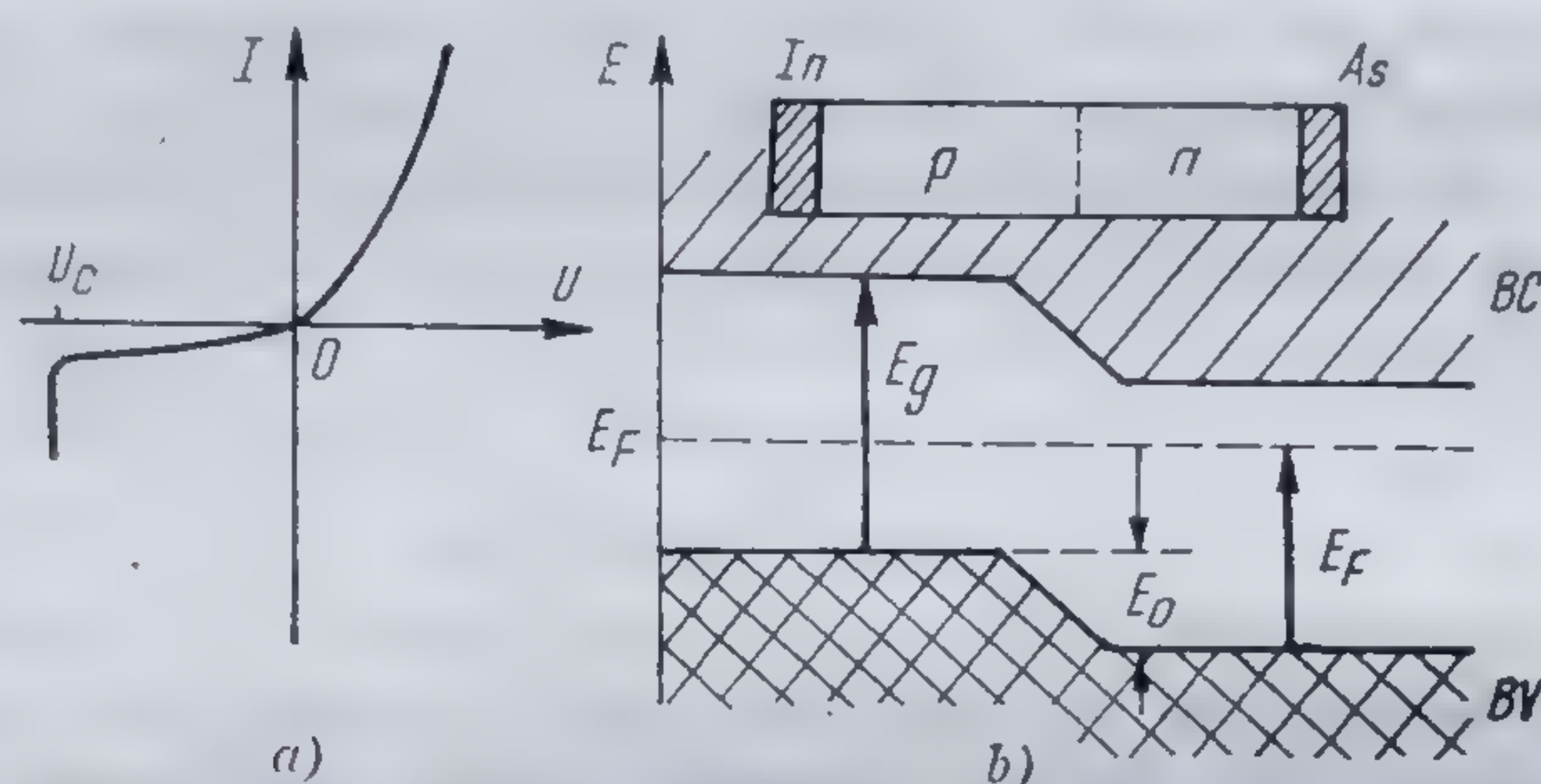


Fig. 11.5.10

respectivei bariere va crește sau va scădea cu Ue , astfel încît curentul total prin joncțiune va fi :

$$I = Ae^{-\frac{E_g}{k_bT}} + Ae^{-\frac{(E_g-E_F)}{k_bT}} e^{-\frac{(E \pm eU + E_F - E_g)}{k_bT}} = Ae^{-\frac{E_g}{k_bT}} [e^{\pm \frac{eU}{k_bT}} - 1]. \quad (11.5.31)$$

De consemnat că o astfel de relație descrie destul de bine curba voltamperică de redresare, schițată în fig. 11.5.10,a.

La o polarizare inversă și la tensiuni aplicate ce depășesc o anumită valoare critică U_c , curentul prin joncțiune crește brusc datorită străpunerii ei prin tunelare de către purtătorii liberi de sarcini. Se obține astfel o *diodă Zener* care poate fi utilizată în calitate de stabilizator de tensiune, întrucît valoarea lui U_c nu va depinde sensibil de valoarea curentului I .

2. *Tranzistorul* este un dispozitiv semiconductor cu două joncțiuni $p-n$ apropiate între ele și polarizate invers. În fig. 11.5.11 este schițat un tranzistor de tip $n-p-n$ cu circuitele sale de alimentare : un circuit BAE , denumit *circuit al emitorului* și un circuit BDC , denumit *circuit al colectorului*. Primul circuit conține o mică sursă de tensiune electromotoare E_E continuă, care asigură polarizarea directă a primei joncțiuni $n-p$ și o rezistență de intrare R_i pe care se aplică tensiunea de intrare în tranzistor (continuă sau alternativă). Al doilea circuit conține o sursă cu t.e.m. E_C mult mai mare decît E_E , care asigură polarizarea inversă

a celei de a doua joncțiunii $p-n$ și un rezistor de rezistență $R_c \gg R_i$ de pe care se culege tensiunea de ieșire U_c a tranzistorului. Se observă că cele două circuite au un contact comun B , pe zona p a semiconduc-

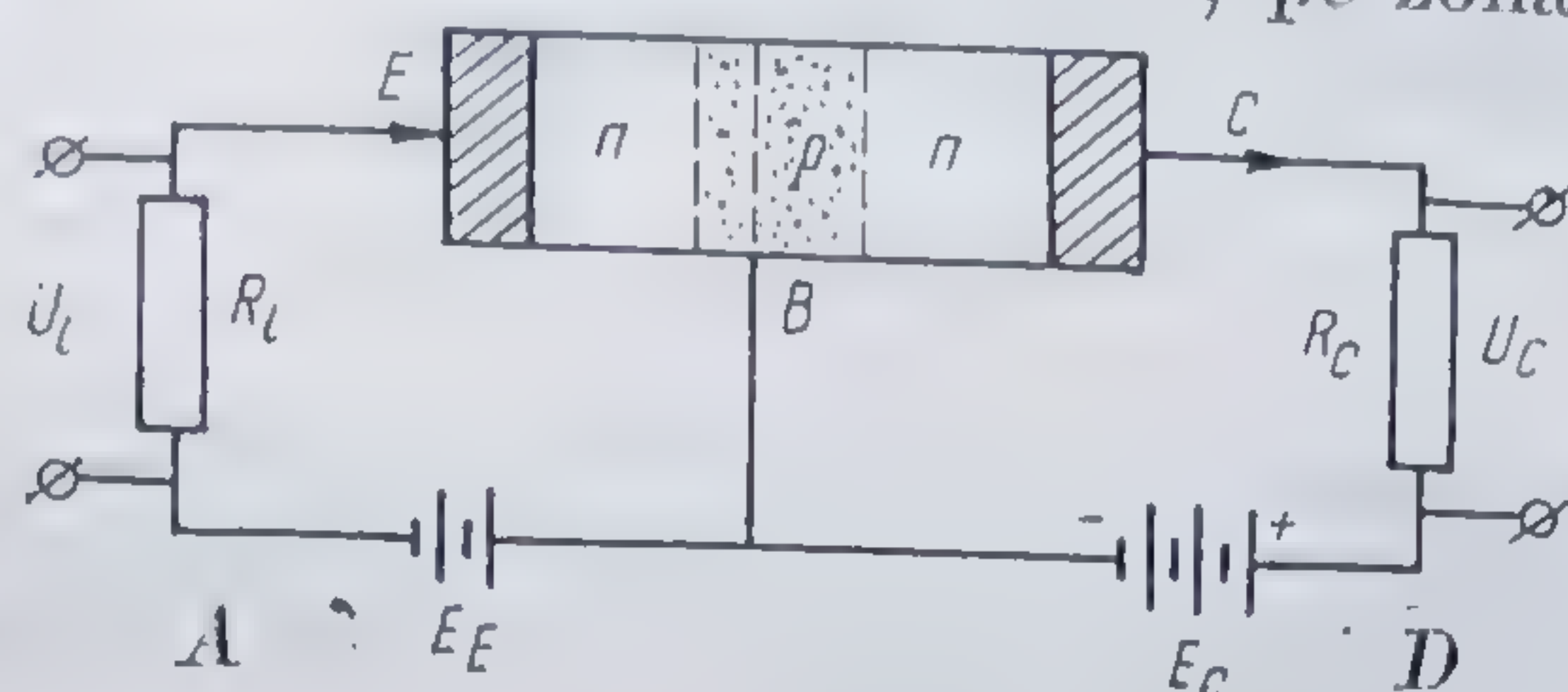


Fig. 11.5.11

torului, care se numește *bază*. Pot fi realizați tranzistori de tip $p-n-p$ și de tip $n-p-n$, reprezentanți schematic în figura 11.5.12.

În circuitele electronice, tranzistorii pot juca rol de *detectie* (redresare) și de *amplificare*, prezentînd avantajele miniaturizării și a consumului mic

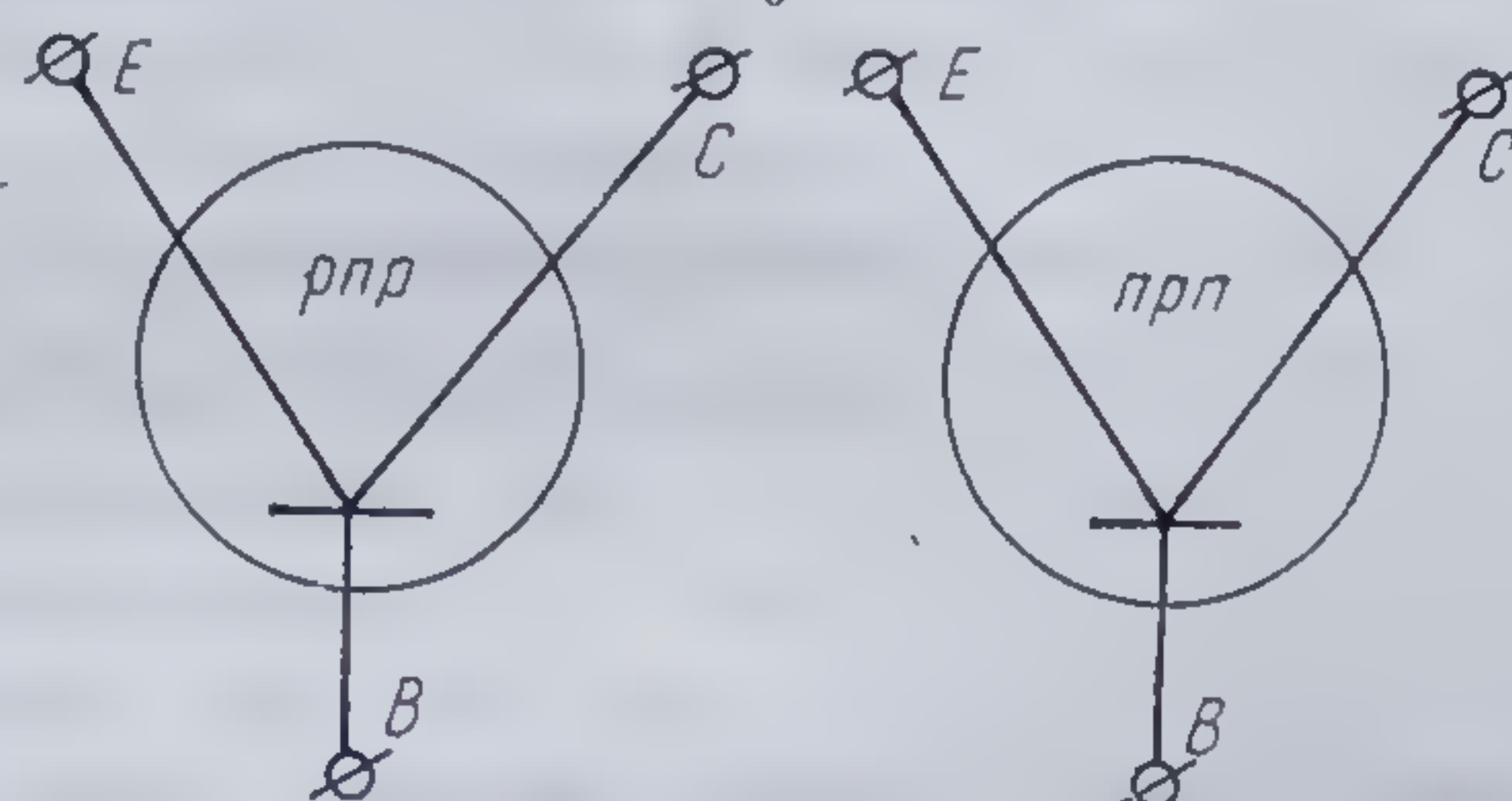


Fig. 11.5.12.

de energie electrică. Rolul de amplificator se poate înțelege ușor și el constă în obținerea unei tensiuni U_c pe rezistența colectorului, mărită față de tensiunea de intrare U_i . Pentru un tranzistor de tip $n-p-n$ (fig. 11.5.12) se observă că circuitul emitorului funcționează la fel ca circuitul unei diode semiconductoare polarizate direct, respectiv el injectează electroni prin emitorul E în zona n , din partea stîngă a tranzistorului. Acești electroni vor străbate ușor prima joncțiune $n-p$, o parte dintre ei se vor recombină cu golurile din zona p , iar cîțiva se vor reîntoarce prin baza B în sursa E_E . Cei mai mulți însă vor ajunge la a doua joncțiune $p-n$, pe care acționează cîmpul electric puternic, creat de sursa colectorului ($E_c \gg E_E$) și vor trece în circuitul colectorului, mărind curentul de colector I_c (de observat că a doua joncțiune $p-n$ este polarizată direct pentru electronii ce vin dinspre zona p și invers pentru electronii din zona n).

Pentru un tranzistor cu baza p suficient de îngustă, aproape toți electronii injectați de emitorul E vor trece în circuitul colectorului C , astfel încît raportul

$$\alpha = \frac{I_c}{I_E} \quad (11.5.32)$$

care reprezintă un *factor de amplificare*, poate avea valori cuprinse între 0,9 și 0,995.

De altă parte, din legile circuitului electric avem

$$I_E = I_B + I_C \quad (11.5.33)$$

egalitate care, combinată cu (11.5.32), conduce la

$$I_C = \frac{\alpha}{1-\alpha} I_E = \beta_I I_E. \quad (11.5.34)$$

Parametrul β_I are rol de *factor de amplificare în curent* al tranzistorului, putînd avea valori cuprinse între 20 și 200. Desigur, întrucît $U_c = I_C R_c$ și $U_e = I_E R_e$ cu $R_c \approx 10^4 \Omega$ și $R_e \approx 10^2 \Omega$, se vor obține factori de amplificare în tensiune, β_c mult mai mari decît β_I .

De consemnat de asemenea că dacă joncțiunea din circuitul colectorului $p-n$ se polarizează invers și suficient de puternic, atunci în această joncțiune se vor declanșa ionizări în avalanșă sub acțiunea ciocnirilor produse de electronii proveniți de la prima joncțiune. Se vor obține astfel curenți de colector de intensități foarte mari, a căror valoare nu va mai depinde de valoarea tensiunii aplicate la colector. Astfel de tranzistori se numesc *de avalanșă* și ei sînt frecvent folosiți în calitate de stabilizatori de tensiune. În sfîrșit, de reținut că s-au construit și dispozitive cu 3 joncțiuni ($p-n-p-n$) sau ($n-p-n-p$), de mare utilitate dovedindu-se tiristorul [59].

§ 11.6. PROPRIETĂȚI MAGNETICE ALE SOLIDULUI

Proprietățile magnetice ale solidului sînt determinate de prezența la nivel atomic și nuclear, a unor momente magnetice elementare (orbitale sau de spin). În § 6.8.4 și 6.8.5 s-a arătat cum pot fi descrise stările de magnetizare ale corpurilor necristaline într-un limbaj clasic*. Starea de magnetizare a unui corp cristalin va fi influențată, desigur, de structura lui cristalină, respectiv de orientarea cîmpului magnetizant extern B_c (sau H) față de axele cristaline.

De notat că vectorul inducție magnetică B este un *vector cu simetrie axială*, deoarece el posedă simetria ∞/mm , adică simetria unei axe de ordin ∞ , orientată în lungul lui B , un plan de reflexie perpendicular la axa ∞ și un număr infinit de plane de reflexie, care conțin axa ∞ . Deci vectorii B și H sînt *vectori axiali*. Proprietăți de simetrie analoge posedă și vectorul de magnetizare M (vezi § 6.8), respectiv momentul magnetic μ .

De consemnat că întrucît cîmpul cristalin intern acționează direct asupra momentelor magnetice orbitale și indirect asupra celor de spin (prin intermediul interacțiunii spin-orbită), proprietățile de simetrie

* Trebuie menționat că o astfel de descriere este formală, deoarece așa cum a demonstrat J. H. van Leeuwen, un sistem clasic, aflat într-un cîmp magnetic B , în condiții de echilibru termodinamic, nu poate avea un moment magnetic.

ale solidului se vor răsfrînge și asupra proprietăților lui magnetice. Influența simetriei cristaline asupra proprietăților magnetice ale unui solid se relevă prin prezența anizotropiei acestor proprietăți, respectiv prin dependența lor de direcții privilegiate din solid. Aceasta determină caracterul tensorial al parametrilor magnetici de material (χ_m și μ_r) ai respectivei structuri cristaline (vezi 6.8.59).

Dar simetriile magnetice sînt mai complexe decît cele cristaline. Așa cum au arătat pentru prima dată Landau și Lifșit [14, 62], pentru a obține simetriile magnetice trebuie să adăugăm la simetriile cristaline o operație de inversie specială, care să schimbe pe \mathbf{M} în $-\mathbf{M}$ (respectiv pe $\langle \vec{\mu} \rangle$ în $-\langle \vec{\mu} \rangle$), aceștia fiind vectori axiali. Avînd în vedere că, potrivit imaginii clasice de moment magnetic, dată de expresia (6.8.48), momentul magnetic este descriptibil printr-un curent electric închis, va rezulta că operația de inversare a lui \mathbf{M} în $-\mathbf{M}$ este echivalentă cu operația de inversie a timpului $t \rightarrow -t$. Prin urmare, expresia hamiltonianului unui sistem de momente magnetice din solid care descrie o stare staționară va trebui să rămînă invariantă atît față de toate operațiile de simetrie ale grupurilor specifice respectivei structuri cristaline, cît și față de operația de inversie a timpului

$$\hat{T}\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, -t). \quad (11.6.1)$$

Se constată că prin adăugarea operației \hat{T} la cele 32 grupuri punctuale de simetrie ale rețelei se obțin 122 de grupuri punctuale magnetice de simetrie, iar prin adăugarea operației \hat{T} celor 230 de grupuri spațiale de simetrie, se obțin 1651 grupuri spațiale magnetice de simetrie. Desigur că cele 32 grupuri punctuale de simetrie vor conține de 32 ori operația de identitate E și deci vor exista tot 32 grupuri punctuale magnetice de simetrie care vor conține numai operația \hat{T} . Aceste grupuri sînt specifice stărilor diamagnetice și paramagnetice (vezi 6.8.4). Vor exista de asemenea operații de oglindire de tip m , pentru care $\hat{T}m = m$ sau $\hat{T}m = -m$, ultima fiind echivalentă cu $m = 0$, respectiv cu inexistența planului de oglindire. Deci, grupurile de simetrie magnetică corespunzătoare ultimei operații, nu-l vor conține pe m (respectiv pe \hat{T}) și de aceea ele corespund stării magnetice cu ordonare antiferomagnetică. Din cele 58 de grupuri punctuale magnetice, 27 posedă o astfel de caracteristică și, prin urmare, sînt specifice structurilor antiferomagnetice, iar restul de 31 vor fi specifice stării feromagnetice.

O tratare completă a simetriilor magnetice a fost dată mai întîi de către A.I. Șhubnikov (vezi [14]), iar elemente de utilizare a lor în studiul unor proprietăți magnetice pot fi găsite în tratatul [14].

11.6.1 DIAMAGNETISMUL ȘI PARAMAGNETISMUL SOLIDELOR (TEORIA CUANTICĂ)

După cum s-a arătat mai sus, hamiltonianul unui sistem de micro-particule purtătoare de momente magnetice dintr-un solid trebuie să rămînă invariant față de toate operațiile de simetrie ale grupurilor mag-

netice de simetrie atașate respectivei structuri, calitate pe care trebuie să o posede și operatorul cuantic \hat{H} .

În cazul în care între microparticulele de masă m_e , purtătoare de momente magnetice elementare, nu intervin interacții de tip dipolar magnetic sau interacții de schimb, respectiv în cazul în care aceste interacții sînt suficient de slabe pentru a putea fi neglijate, operatorul \hat{H} se va putea exprima printr-o relație de forma

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^N \left[\frac{1}{2m_e} \hat{p}_k^2 + V(\mathbf{r}_k) - \frac{e}{2m_e} (\hat{\mathbf{L}}_{lk} + 2\hat{\mathbf{L}}_{sk}) \cdot \mathbf{B} + \frac{e^2}{8m_e} (\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{r}}_k)^2 \right]. \quad (11.6.2)$$

Prin alegerea unor funcții de undă compatibile cu simetria magnetică a cristalului luat în studiu (vezi § 11.2.3) și avînd în vedere că

$$(\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{r}}_k)^2 \equiv B^2 \hat{r}_k^2 - B^2 \hat{z}_k^2 = B^2 (\hat{x}_k^2 + \hat{y}_k^2) \quad (11.6.3)$$

vom putea obține valori (proprie) ale lui \hat{H} , din expresia

$$\langle \hat{H} \rangle = \int \psi^* \hat{H} \psi dV = NE_0 - \frac{eB}{2m_e} \sum_k (\langle L_l \rangle_{zk} + 2\langle L_s \rangle_{zk}) + \frac{e^2 B^2}{8m_e} \sum_k (\langle x_k^2 \rangle + \langle y_k^2 \rangle). \quad (11.6.4)$$

Diferența

$$\Delta U = \langle H \rangle - NE_0 = U_{para} + U_{dia} \quad (11.6.5)$$

reprezintă creșterea energiei interne ΔU a sistemului în prezența cîmpului magnetic extern $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$.

Se observă că această creștere ΔU este constituită din doi termeni, unul *paramagnetic*

$$U_{para} = - \frac{eB}{2m_e} \sum_k (\langle L_l \rangle_{zk} + 2\langle L_s \rangle_{zk}) \quad (11.6.6)$$

care intervine numai în sistemele de microparticule purtătoare de momente magnetice proprii nenule (orbitale sau de spin) și altul *diamagnetic*

$$U_{dia} = \frac{e^2 B^2}{8m_e} \langle \sum_k (x_k^2 + y_k^2) \rangle \quad (11.6.7)$$

care intervine pentru orice sistem de microparticule. Avînd în vedere că energia internă a unității de volum, dată de interacțiunea sistemului cu cîmpul exterior, poate fi exprimată și prin intermediul vectorului de magnetizare \mathbf{M} , în conformitate cu relația (6.8.40), vom putea scrie

$$M_{dia} = \frac{\partial U_{dia}}{\partial B} = \frac{e^2 B}{4m_e} \langle \sum_k (x_k^2 + y_k^2) \rangle \quad (11.6.8)$$

Pentru o structură diamagnetică cu n_0 ioni sferici pe unitate de volum, fiecare ion avînd Z sarcini și luînd în considerație că pentru orbitali sferici $\langle(x_k^2 + y_k^2)\rangle = \frac{2}{3}\langle r^2\rangle$, se va obține :

$$M = - \frac{Ze^2\mu_0 n_0 \langle r^2 \rangle}{6 m_e} H; \chi_m = - \frac{n_0 Ze^2 \mu_0 \langle r^2 \rangle}{6 m_e}. \quad (11.6.9)$$

Aceste rezultate sînt identice cu cele obținute în tratarea clasică a diamagnetismului (vezi(6.8.103)). Metoda folosită aici este însă mult mai generală, ea pretîndu-se la un calcul de genul celui folosit în teoria perturbațiilor (§ 8.9), așa cum a arătat pentru prima dată Van Vleck [74]. Astfel, dacă se ia pentru operatorul \hat{H} o expresie de forma

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + B_z W_1 + B_z^2 W_2 + \dots \quad (11.6.10)$$

în care sînt cuprinși termeni de perturbație de diverse grade în $B_z(B\parallel Oz)$, dați de energia sistemului în cîmpul magnetic, atunci se poate calcula susceptivitatea magnetică χ_m în diverse ordine de aproximație.

Pentru aproximația de ordinul întîi se obține

$$\chi_m = - \frac{n_0 Ze^2 \mu_0 \langle r^2 \rangle}{6 m_e} + \frac{2}{3} \sum_{k'j' \neq kj} \frac{\langle k'j' | M^{(0)} | kj \rangle}{E_{k'j'} - E_{kj}}. \quad (11.6.11)$$

De remarcat că termenul al doilea din această expresie este pozitiv și el apare numai în cazul sistemelor care nu posedă o simetrie centrală (pentru care momentele perturbației de ordinul întîi, $M^{(0)}$ sînt diferite de zero).

Prezența momentelor magnetice proprii, de spin $\langle \mu_s \rangle$ și orbitale $\langle \mu_l \rangle$, maschează în general diamagnetismul printr-un paramagnetism mult mai puternic, descris de termenul (11.6.6). Dacă intervine și cuplajul $L-S$, atunci în condiții staționare, la temperatura T , întrucît

$$E_{m_J} = - \frac{eB}{2m_e} (\langle L_L \rangle + 2\langle L_S \rangle) = - \frac{e\hbar}{2m_e} g_J B m_J = - \mu_B g_J m_J \quad (11.6.12)$$

magnetizarea sistemului va fi descrisă de expresia

$$M = n_0 \mu_B \frac{\sum_{m_J=-J}^{m_J=J} m_J g_J e^{-\frac{\mu_B m_J g_J B}{k_B T}}}{\sum_{m_J=-J}^{m_J=J} e^{-\frac{\mu_B m_J g_J B}{k_B T}}} \quad (11.6.13)$$

μ_B fiind magnetonul elementar electronic (magnetonul Bohr-Procopiu). Efectuînd sumarea în această expresie după numerele cuantice magno-

tice m_J , se obține

$$M = n_0 \mu_B \cdot B_J(a); \quad a = \frac{\mu_B g_J B}{k_b T} \quad (11.6.14)$$

Aici prin $B_J(a)$ s-a notat expresia

$$B_J(a) = \frac{2J+1}{2J} \operatorname{cth} \frac{2J+1}{2J} a - \frac{1}{2J} \operatorname{cth} \frac{a}{2J} \quad (11.6.15)$$

care este cunoscută sub denumirea de *funcție Brillouin*.

De remarcă că în cazul unor cîmpuri magnetice slabe, pentru care la temperatura camerei $a \ll 1$, se poate scrie aproximativ

$$M \simeq \frac{\mu_B^2 g_J^2 J(J+1) B}{3k_b T} \quad (11.6.16)$$

rezultat care conduce la o lege de tip Curie (6.8.111) pentru susceptivitatea magnetică $\chi_m(T)$ și anume:

$$\chi_m(T) = \frac{C}{T}; \quad C = \frac{\mu_0 \mu_B^2 p_J^2}{3k_b}; \quad p_J = g_J \sqrt{J(J+1)}. \quad (11.6.17)$$

Mărimea p_J este denumită adesea „număr efectiv de magnetoni elementari” participanți la paramagnetism. Pentru un paramagnetism de spin pur, de exemplu, se regăsește $p_J = p_S = 2\sqrt{S(S+1)}$. Un astfel de caz se întâlnește la ionii grupei fierului, în starea paramagnetică ($T > T_c, T_N$). În schimb, sistemele formate din ioni ai pămînturilor rare posedă un paramagnetism de tip atomic, așa cum se vede în tabelul următor:

Nr. crt.	Ionul	$p_J = g_J \sqrt{J(J+1)}$	$p_S = 2\sqrt{S(S+1)}$	p_{experim}
1	Cr^{3+}	0,77	3,87	3,8
2	Ni^{2+}	5,59	2,83	3,2
3	Fe^{2+}	6,70	4,90	5,4
4	Ce^{3+}	2,54	2,41	2,4
5	Gd^{3+}	7,94	8,02	8,0
6	Yb^{3+}	4,54	4,52	4,5

De notat că substanțele paramagnetice de spin și-au găsit o interesantă utilizare practică, în obținerea temperaturilor foarte scăzute, prin *tehnica demagnetizării lor adiabatice*. De exemplu, prin demagnetizarea adiabetică a sulfatului de galiu (GaSO_4), de la $B_i = 2,76 \text{ T}$, la $B_f = 0,85 \text{ T}$ se obține, plecînd de la $T_i = 4,8 \text{ K}$, o temperatură finală $T_f = 0,132 \text{ K}$, iar cu ajutorul unui alaun de fier s-a obținut prin demagnetizare adiabetică o temperatură finală de $2 \cdot 10^{-3} \text{ K}$ ($T_i = 4,2 \text{ K}$; $B_i = 2,3 \text{ T}$; $B_f = 10^{-4} \text{ T}$).

Principiul acestei metode constă în crearea, prin demagnetizare, a unei dezordini în orientarea momentelor magnetice de spin, care în prealabil, în câmpul B_i și la temperatura T_i , fuseseră orientate paralel și în același sens cu B_i . Apariția unei astfel de dezordini înseamnă, desigur, o creștere a energiei sistemului de spini, deci implicit o absorbție de căldură Q pe care în condiții de izolare adiabatică spinii o pot lua doar de la rețeaua cristalină proprie, producând răcirea acesteia.

De consemnat, în același context, că și în cazul teoriei paramagnetismului se poate construi o metodă de calcul bazată pe tehnica perturbațiilor [74], care va completa rezultatul (11.6.17) cu un termen constant, de forma celui din (11.6.11). De asemenea, în cazul metalelor va interveni un *paramagnetism al electronilor de conducție*, întrucât acești electroni sînt purtători de momente magnetice elementare de spin, egale cu μ_B . Prin calcule analoge celor de mai sus se obține expresia :

$$\chi_m = \frac{n_e \mu_B^2 \mu_0}{3k_b T} = \frac{n_0 \mu_B^2 \mu_0}{3k_b T_F} \quad (11.6.18)$$

(avînd în vedere că la conducție participă numai $n_e = n_0 \frac{T}{T_F}$ electroni). Un calcul mai exact conduce la o expresie de formă

$$\chi_m = \frac{2}{3} \frac{n_0 \mu_B^2 \mu_0}{E_F}; \quad \mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \frac{\text{H}}{\text{m}} \quad (11.6.19)$$

L. Landau arată că, în cazul metalelor, intervine și un diamagnetism al electronilor de conducție, descris de susceptivitatea

$$\chi_m = -\frac{1}{3} \frac{n_0 \mu_B^2 \mu_0}{E_F} \quad (11.6.20)$$

Trebuie însă remarcat faptul că în rezultatele înregistrate mai sus nu s-a ținut seama de simetria magnetică a cristalului, deoarece nu au fost luate în considerație interacțiile de tip dipolar dintre momentele magnetice. Firește, nu întotdeauna o astfel de aproximație este satisfăcătoare [14].

Interacțiile de tip dipolar magnetice pot să apară atât între momentele magnetice, cît și între aceste momente și câmpul cristalin al rețelei. Efectele lor se relevă prin despicări ale nivelelor energetice (ale ionilor magnetici respectivi), care conduc la despicări ale liniilor de rezonanță paramagnetică de spin.

11.6.2. ORDONAREA MAGNETICĂ ÎN STAREA SOLIDĂ

Anomalia efectului giromagnetic și fenomenele de rezonanță magnetică de spin au demonstrat că ordonarea magnetică spontană, constatată în practică la unele solide, apare sub acțiunea unor interacții de schimb

între spinii vecini, de forma celor descrise de expresia (10.7.19). Aceste interacții sînt de tip „cooperativ”, în sensul că ele determină o ordonare a spinilor care va fi avantajată de creșterea numărului de participanți la interacție. În cazul a doi spinii vecini, S_1 și S_2 , s-a văzut că hamiltonianul interacției de schimb este dat de expresia

$$U_S = - 2J_{12} S_1 \cdot S_2 \quad (11.6.21)$$

J_{12} fiind integrala de schimb, definită prin relația (10.7.23):

Se observă că dacă $J_{12} > 0$, atunci în starea fundamentală (cu energie minimă) spinii S_1 și S_2 se orientează paralel și în același sens între ei, realizînd o *ordonare feromagnetică*.

În § 6.8.5 s-a arătat că starea feromagnetică este specifică unor metale din grupa de tranziție 3d (Ni, Fe, Co) care posedă orbitali 3d necomplet populați cu electroni și ai căror spinii atomici totali sînt diferiți de zero ($S \neq 0$). Dacă se urmărește structura de bandă a unor astfel de metale (fig. 11.3.11.c) se constată că banda 3d este foarte îngustă în comparație cu banda 4s avînd, prin urmare, o mare densitate de stări în apropierea nivelului Fermi E_F .

Cu alte cuvinte, energia cinetică a electronilor 3d este extrem de redusă în comparație cu energia cinetică a electronilor 4s, electronii 3d fiind destul de strîns legați de nodurile rețelei cristaline. De aceea, schimbarea orientării spinilor ionilor vecini din poziția antiparalelă în poziția paralelă se va face fără schimbări însemnate în energia cinetică a sistemului, ea putînd fi produsă de interacția slabă de schimb.

O astfel de interpretare a feromagnetismului a fost inițiată de W. Heisenberg [135]. Pe baza ei s-au obținut rezultate în concordanță cu datele experimentale privind existența domeniilor de magnetizare, a magnetizării de saturație și a curbilor de histerezis pentru starea feromagnetică.

Trebuie notat totodată că interacția de schimb descrisă de hamiltonieni de tipul (11.6.21) este izotropă și, de aceea, în starea fundamentală, ea conservă momentul de spin total $\langle L_S \rangle$. În corpuri cristaline însă, prin intermediul interacțiilor spin-orbită și a celor de tip dipolar-magnetice, intervin și efecte de anizotropie, care determină apariția unor cîmpuri magnetice de anizotropie magneto-cristalină (magnetizarea spontană se orientează pe direcția de ușoară magnetizare în starea de echilibru). În astfel de cazuri, va rămîne constantă numai proiecția spinului pe direcția Oz după care este orientat cîmpul magnetic efectiv H_{ef} .

Pentru o structură cristalină cu ordonare feromagnetică energia de schimb este dată de expresia

$$U_{sch} = - 2 \sum_{ij} J_{ij} S_i \cdot S_j \quad (11.6.22)$$

sau, admițînd că interacția de schimb este diferită de zero numai pentru partenerii de coordinație unu (deci pentru primii z vecini cei mai apro-

plăți), pentru care integrala de schimb are aceeași valoare J

$$U_{sch} = -2J \sum_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (11.6.23)$$

sumarea făcându-se aici pe perechile de spini învecinați.

Pe baza unui hamiltonian de spin, de forma (11.6.23), la care se adaugă și termeni corespunzători interacției spinului \mathbf{S}_i cu câmpul magnetic exterior \mathbf{H} , respectiv cu câmpul de anizotropie magnetocristalină, se pot elabora teorii cuantice sau semicuantice asupra feromagnetismului și în general a stărilor cu ordonare magnetică. În teoriile semicuantice, spinul \mathbf{S} se înlocuiește cu momentul magnetic de spin $\langle \mu_s \rangle = \mu_B \mathbf{S}$, ale cărui valori cuantificate sînt date de expresia

$$\langle \mu_s \rangle = \mu_B \sqrt{S(S+1)} \quad (11.6.24)$$

și se folosește imaginea clasică a precesiei acestor momente în jurul câmpului magnetic \mathbf{B} . Vom prezenta, pe baza acestei imagini, o teorie calitativă a curbelor de magnetizare pentru un corp feromagnetic.

Fie N numărul de noduri ale rețelei cristaline în care se găsesc ioni feromagnetici identici cu spinul S , fiecare ion avînd z vecini de rang unu. Vom admite că în cadrul unui monodomeniu de magnetizare toate momentele magnetice de spin sînt orientate pe aceeași direcție și în același sens, așa cum prevede teoria câmpului molecular a lui P. Weiss (§ 6.8.5). Dacă se calculează pătratul momentului magnetic pentru întregul corp solid se va obține expresia

$$\left(\sum_{i=1}^N \langle \mu_i \rangle \right)^2 = \sum_{i=1}^N \langle \mu_i \rangle^2 + \sum_{i \neq j} \langle \mu_i \rangle \langle \mu_j \rangle \quad (11.6.25)$$

din care, cu (11.6.24), rezultă

$$\sum_{i \neq j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = S_i(S_i + 1) - NS(S + 1) \quad (11.6.26)$$

S_i fiind numărul cuantic de spin total al sistemului.

Ținînd cont că în sumă din (11.6.25) intră $N(N-1)$ termeni de forma (11.6.26) și că există $Nz/2$ perechi de spini cuplați prin interacția de schimb, vom obține expresia

$$U_{sch} = -2J \frac{Nz}{2} \frac{S_i(S_i + 1) - NS(S + 1)}{N(N-1)} \quad (11.6.27)$$

N reprezentînd numărul total de noduri ale rețelei. Se observă că pentru $S = 1$, spinul total S_i va fi dat de toate nodurile ale căror momente magnetice de spin participă la magnetizarea corpului. Pentru a calcula acest număr, E. Ising [10] admite că din cei N spini, pentru care există numai două orientări posibile (în lipsa altor interacții, afară de interacția de schimb), un număr „ r ” de spini au orientarea în sensul respectivei mag-

netizări, iar restul $l = N - r$ de spini au orientarea în sens invers, astfel încît raportul

$$y = \frac{r-l}{N} = \frac{M}{M_s} \quad (11.6.28)$$

va reprezenta magnetizarea relativă a sistemului. Deci se va putea pune

$$S_t = yN. \quad (11.6.29)$$

Cu acest rezultat, expresia (11.6.27) ia forma (dacă se ia $S = 1$)

$$U_{sch} = -Jz \frac{yN(yN+1) - 2N}{N-1} \approx JzNy^2 \quad (11.6.30)$$

Desigur, distribuția spinilor în sensul magnetizării \mathbf{M} sau în sens invers ei, va fi o distribuție statistică. Folosind o lege de distribuție microcanonică, pe baza formulei lui Boltzmann (5.2.43) se poate calcula entropia S și respectiv energia liberă F care descriu, la nivel macroscopic, starea de echilibru termodinamic a sistemului de spini cuplați prin interacție de schimb și aflați într-un câmp magnetic exterior de intensitate \mathbf{H} . Într-adevăr, cu (11.6.28) se poate scrie

$$S = k_b \ln \frac{N!}{r!l!} = k_b \ln \frac{N!}{\left[\frac{N}{2}(1+y)\right]! \left[\frac{N}{2}(1-y)\right]!} \quad (11.6.31)$$

Cu formula lui Stirling, pentru energia liberă se va obține expresia

$$F = U_H + U_{sch} - TS = -N y \mu_0 H - JzNy^2 - \frac{k_b TN}{2} [2 \ln 2 - (1+y) \ln(1+y) - (1-y) \ln(1-y)] \quad (11.6.32)$$

Din condiția de echilibru, $\left(\frac{\partial F}{\partial y}\right)_T = 0$, prin calcule simple, rezultă

$$y = \text{th} \left[\frac{2zJ}{k_b T} y + \frac{\mu_0 H}{k_b T} \right] \quad (11.6.33)$$

În figura 11.6.1 sînt reprezentate grafic izotermele $y = f(H)$. Se observă că, la $T = 0$ K, $y = 1$ și deci $M = \pm M_s$, M_s fiind magnetizarea de saturație la 0 K a corpului feromagnetic respectiv. Pentru $T > 0$ K rezultă că $y < 1$, dar y crește odată cu H , atîngînd asimptotic o valoare de saturație pentru care $M_s(T) < M_s(0)$.

Pe diagrama din fig. 11.6.1 este reprezentată și dreapta corespunzătoare temperaturii

$$T = T_c = \frac{2zJ}{k_b} \quad (11.6.34)$$

Se observă că în câmp magnetic exterior nul ($H = 0$), relația (11.6.33) se reduce la forma

$$y_1 = \text{th} \frac{T_c}{T} y. \quad (11.6.35)$$

Aceasta este o ecuație transcendentă, care descrie o curbă ce va fi întredrăită de dreapta $y_2 = y$, numai dacă $T_c/T \leq 1$, deci numai dacă temperatura corpului este inferioară unei temperaturi critice, T_c .

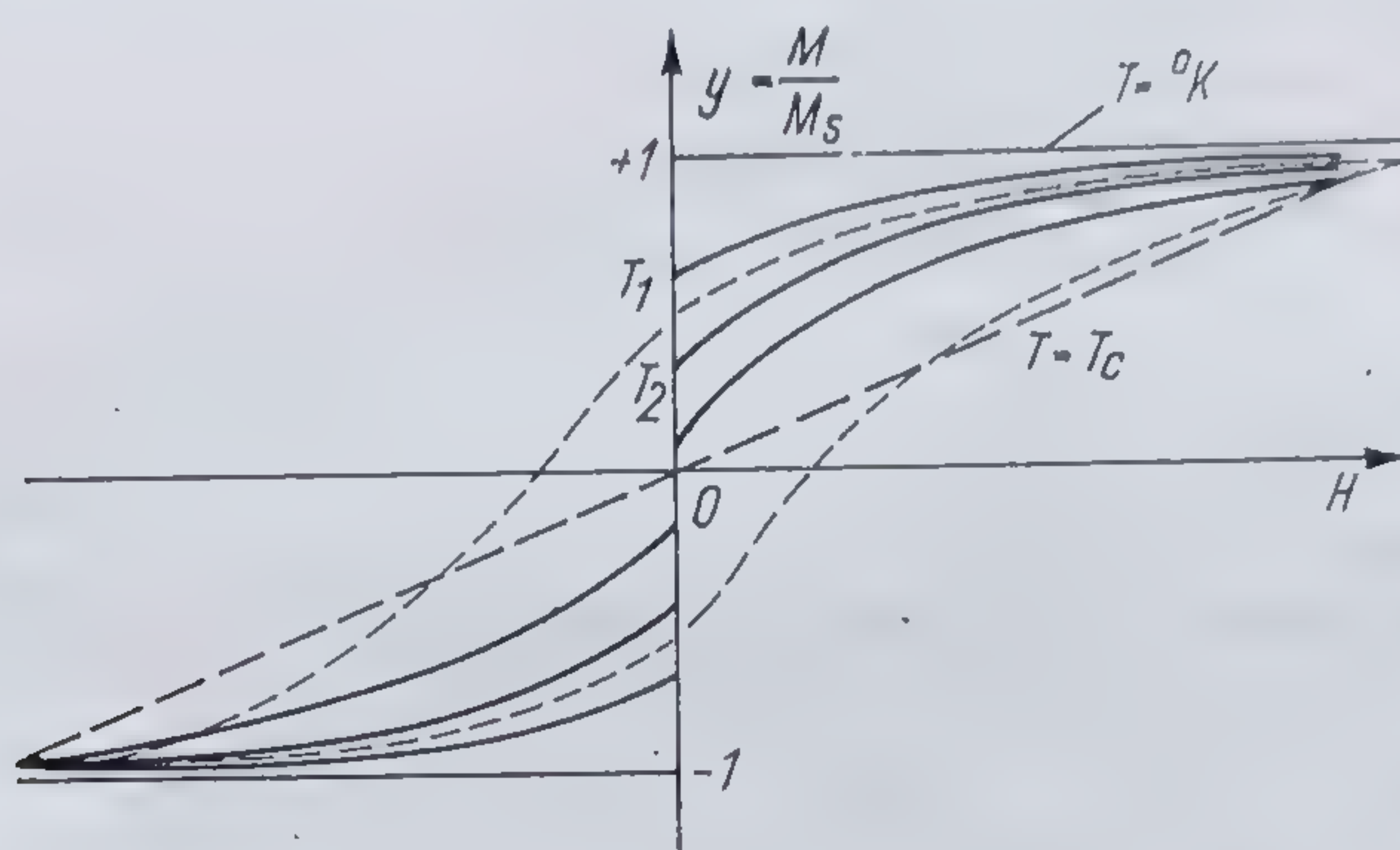


Fig. 11.6.1

Temperatura T_c este *temperatura Curie*, definită în cadrul teoriei fenomenologice a câmpului molecular a lui P. Weiss, dar de data aceasta se constată că valoarea ei este determinată de mărimi cu semnificație fizică intrinsecă, cum este integrala de schimb J (vezi (11.6.34)) și de tipul structurii cristaline.

Trebuie precizat că studiul făcut mai sus nu ține seama și de fenomenele de relaxare, fenomene ireversibile care transformă izotermele $y = f(H)$ reprezentate în figura 11.6.1 în *bucle de histerezis* (de forma celei prezentate punctat în figură). Devine astfel evident faptul că esența procesului de magnetizare a unui corp feromagnetic este corect descrisă de interacția de schimb.

Studiul stării feromagnetice, în cadrul limitei semiclasice, în care se admite că momentele magnetice de spin $\langle \mu_s \rangle$ execută mișcări de precesie în jurul câmpului magnetic extern \mathbf{H} , poate fi dezvoltat atât pentru regimuri statice, cât și pentru regimuri dinamice. Trebuie reținut însă că pentru spinul total atomic, $\mathbf{S} = \sum_i \mathbf{s}_i$, există nu numai două orientări posibile față de un câmp exterior \mathbf{H} , (paralel și antiparalel cu \mathbf{H}), ci sînt posibile toate orientările (de unghiul θ ; fig. 11.6.2) pentru care este îndeplinită condiția

$$\cos \theta = \frac{\langle \mu_s \rangle_z}{\langle \mu_s \rangle} = \frac{m_s}{\sqrt{S(S+1)}} \quad (11.6.36)$$

Se observă că pentru S de valori ridicate pot exista și precesii cu unghiuri de precesie 0 oricât de mici. Astfel de abateri (perturbații) ale momentului magnetic de spin atomic (sau ionic) de la starea fundamentală (cînd $\langle \mu_s \rangle \parallel \mathbf{H}$) pot fi produse de diverse cauze, cum sînt fluctuațiile termice, sau acțiunea unor cîmpuri magnetice perturbatoare externe de intensități slabe și neparalele cu \mathbf{H} .

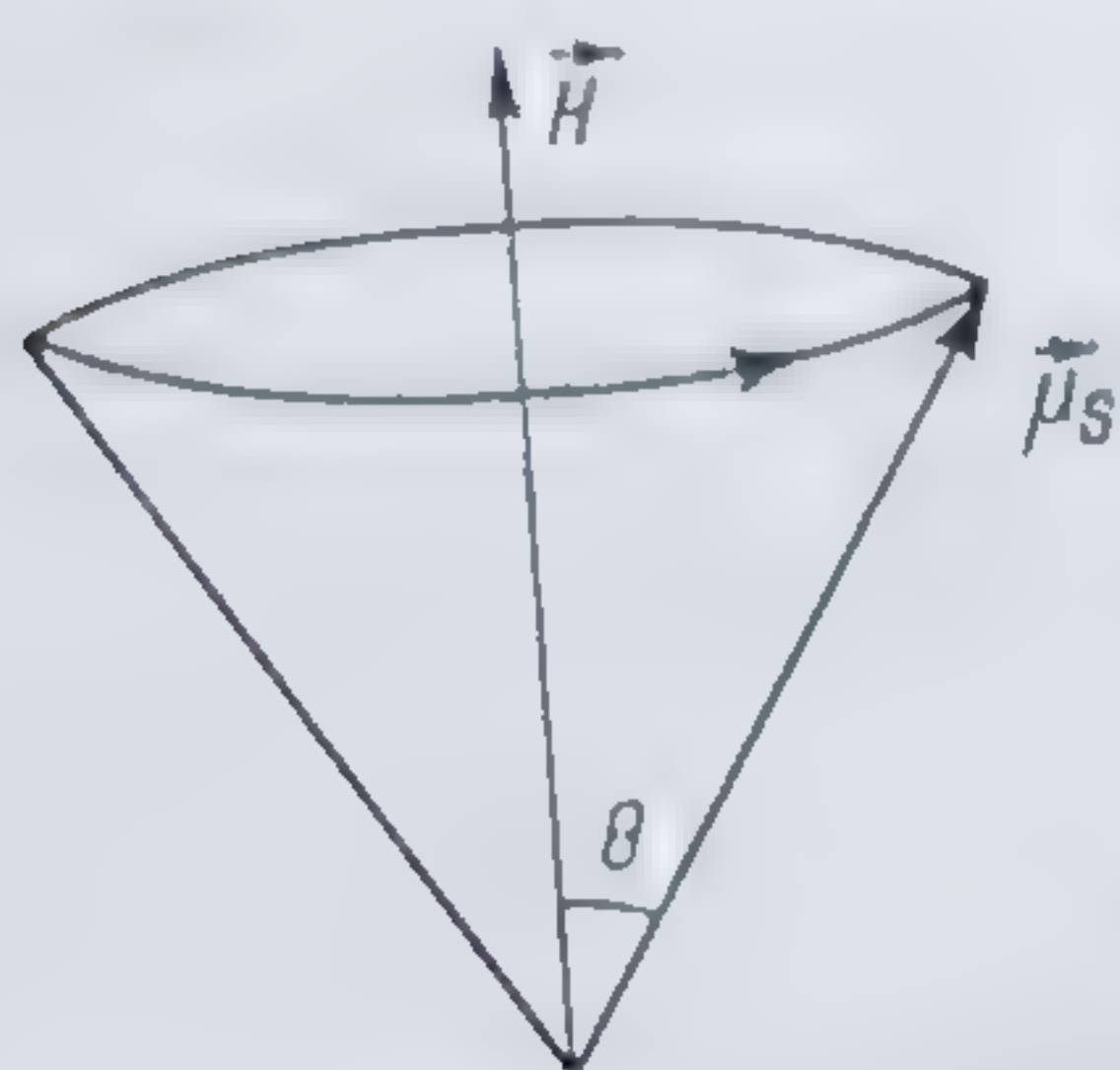


Fig. 11.6.2

Se constată că perturbațiile dinamice dintr-un sistem de spini ordonați se transmit, prin intermediul forțelor de schimb, din aproape în aproape, sub formă de unde, denumite *unde de spin*. În figura 11.6.3 este schițată o astfel de undă de spin, care constă în precesia spinilor în jurul unui cîmp extern \mathbf{H} , unghiul de precesie θ fiind mic. De pe figură se

desprinde ce trebuie să se înțeleagă, în cadrul limitei semiclassical, prin undă de spin și prin lungimea de undă λ a acesteia.

Obținerea legii de dispersie $\omega = \omega(k)$ ocupă o importanță centrală în studiul undelor de spin. O astfel de lege rezultă, așa cum s-a văzut în § 11.4, din analiza mișcării de precesie a spinului S în cîmpul de inte-

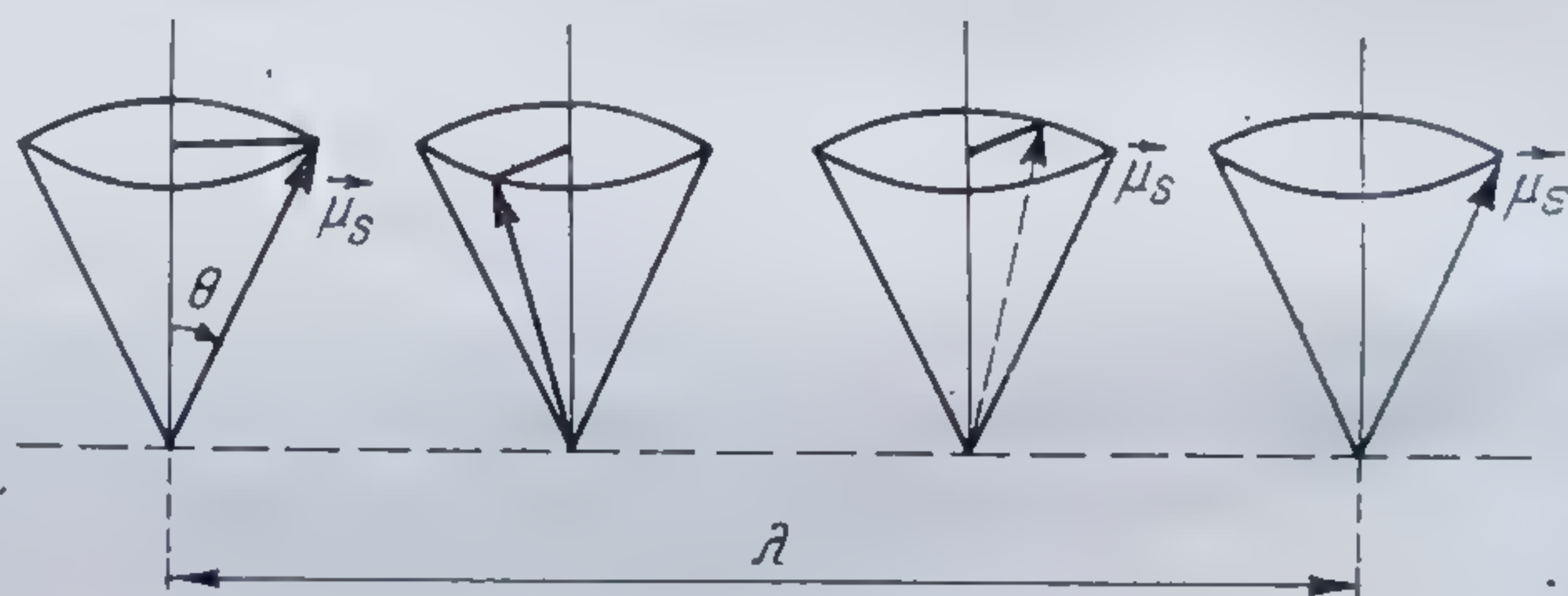
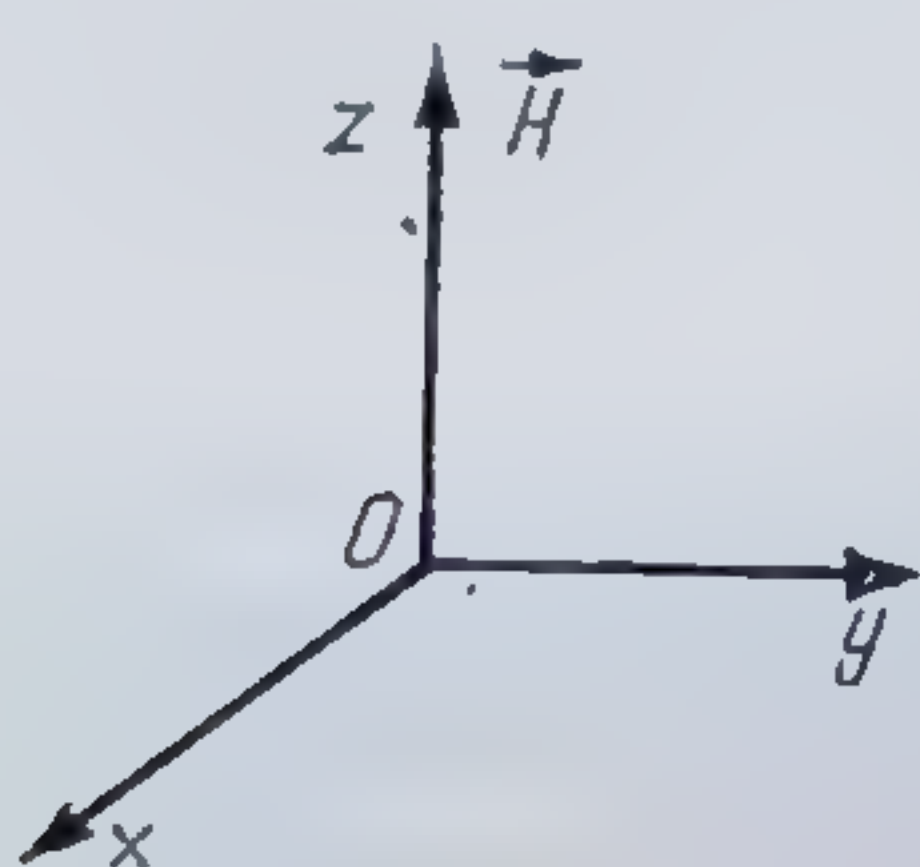


Fig. 11.6.3

racție cu ceilalți spini, respectiv cu cîmpul magnetic exterior. Pentru a stabili legea unei astfel de mișcări, vom admite că în respectivul sistem de spini intervin numai interacții de schimb și interacții de tip Zeeman cu cîmpul exterior \mathbf{H} , astfel încît hamiltonul sistemului de spini este de forma

$$H = - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - 2 \mu_B B_z \sum_i S_{zi}. \quad (11.6.37)$$

Pe baza acestui hamiltonian* vom putea scrie ecuația de mișcare a spinului S_i , respectiv a momentului cinetic de spin $\mathbf{L}_s = \hbar \mathbf{S}_i$, care în

* În general, la interacțiile de schimb și Zeeman trebuie adăugată și interacția dipolar-magnetică, descrisă, potrivit relațiilor (6.8.40) și (6.8.39), de un termen de forma

$$H_{antiz} = - \frac{1}{2} \sum_j \frac{\mu_0 \mu_B S^2}{4\pi r_{ij}^3} [\mathbf{r}_{ij}^2 (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) - 3(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})].$$

limita tratării semiclassical va fi dată de paranteza Poisson $[L_s, H]_-$ atașată momentului cinetic de spin, respectiv de relația]

$$\frac{\partial \mathbf{L}_c}{\partial t} = [\mathbf{L}_s, H]_- \quad (11.6.38)$$

Dacă ținem seama de relațiile de necomutare ale momentului cinetic (relații date de comutatorul $[\hat{L}_{s_x}, \hat{L}_{s_y}]_- = i\hbar \hat{L}_{s_z}$), atunci prin calcule simple, pentru spinul \mathbf{S}_i situat în nodul „i” al unei rețele cristaline, se va obține următoarea ecuație de mișcare

$$\frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t} = \gamma [\mathbf{S}_i \times \mathbf{B}_{ef}]. \quad (11.6.39)$$

Aici prin \mathbf{B}_{ef} s-a notat inducția *cîmpului magnetic efectiv*, rezultat din compunerea cîmpului extern \mathbf{H} cu cîmpul intern \mathbf{H}_i , generat de interacția de schimb, deci

$$\mathbf{B}_{ef} = \mu_0 \mathbf{H} + \frac{\mu_0}{\mu_B} J \sum_j \mathbf{S}_{i \neq j}. \quad (11.6.40)$$

Factorul γ din ecuația (11.6.39) exprimă raportul giromagnetic al purtătorului de moment magnetic și este dat, potrivit relației (10.6.21), de expresia

$$\gamma = g_s \frac{e}{2m_e}. \quad (11.6.41)$$

Pentru deviații \mathbf{s}_i de valori mici ale spinului \mathbf{S}_i în raport cu valoarea sa de echilibru \mathbf{S}_0 , prin înlocuirea în ecuația (11.6.39) a expresiei

$$\mathbf{S}_i(t) = \mathbf{S}_0 + \mathbf{s}_i(t) \quad (11.6.42)$$

și păstrarea numai a termenilor liniari în \mathbf{s}_i , se obține ecuația]

$$\frac{d\mathbf{s}_i}{dt} = \gamma \left[\mathbf{S}_0 \times \frac{2}{\mu_B} J \sum_j \mathbf{s}_j + \mu_0 \mathbf{s}_i \times \mathbf{H} \right]. \quad (11.6.43)$$

În această ecuație, abaterea \mathbf{s}_i se referă la spinul din nodul i al rețelei cristaline. Printr-o transformată Fourier de forma

$$\mathbf{s}_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \mathbf{s}_k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \quad (11.6.44)$$

în care N reprezintă numărul de atomi din rețea, iar \mathbf{k} este vectorul de undă din prima zonă Brillouin a sistemului, se va înlocui abaterea spinului atomic față de starea sa de echilibru printr-o abatere de spin colectivă \mathbf{s}_k , în care, prin intermediul variației lui \mathbf{k} din cadrul primei zone Brillouin,

va fi încorporată și simetria respectivei rețele cristaline. Cu această transformare (11.6.44), ecuația (11.6.43) ia forma

$$\frac{ds_k}{dt} = \gamma(s_k \times S_0) \left(\frac{H}{S} + \frac{zJ}{\mu_B} - \frac{J}{\mu_B} \sum_{R_n} e^{ik \cdot R_n} \right) \quad (11.6.45)$$

în care $S = |S_0|$, iar R_n este vectorul de translație al rețelei cristaline, definit prin relația (11.2.1).

Pentru aflarea soluțiilor ecuației (11.6.45) este util să introducem componente circulare, de forma

$$s_k^\pm = s_{k_x} \pm i s_{k_y} \quad (11.6.46)$$

cu ajutorul cărora această ecuație ia forma

$$\dot{s}_k^\pm = \pm i s_k^\pm \gamma \left[H + \frac{2JS}{\mu_B} \left(z - \sum_{R_n} e^{ik \cdot R_n} \right) \right]. \quad (11.6.47)$$

Vom presupune că soluțiile acestei ecuații sînt funcții armonice de timp, de forma

$$s_k^\pm(t) = s_0^\pm e^{-i\omega_k t}. \quad (11.6.48)$$

Atunci, în cazul unei rețele cu structură cubică, pentru care

$$\sum_k e^{ikR_n} = 2(\cos a k_x + \cos a k_y + \cos a k_z) \quad (11.6.49)$$

prin introducerea lui (11.6.48) în (11.6.47) se obține

$$\omega_k = \frac{2JS}{\hbar} [z - 2(\cos a k_x + \cos a k_y + \cos a k_z)] + \frac{2\mu_B \mu_0 H}{\hbar} \quad (11.6.50)$$

rezultat ce exprimă *legea de dispersie a undelor de spin*.

Prin calcule analoge se pot obține legi de dispersie corespunzătoare pentru unde de spin în sisteme antiferomagnetice, respectiv ferimagnetice [74]. Potrivit concepției lui Néel [93], în aceste structuri magnetice ordonate intervin două *subrețele magnetice* (vezi și § 6.8.5), în care spinii sînt orientați antiparalel între ei în subrețele vecine, întrucît integrala de schimb J , pentru astfel de structuri are o valoare negativă ($J < 0$). La structuri cu ordonare antiferomagnetică momentele magnetice de spin, respectiv magnetizările M_1 și M_2 ale celor două subrețele magnetice, sînt egale între ele ($M_1 = -M_2$), iar în structuri cu ordonare ferimagnetică sînt de valori diferite ($M_1 \neq M_2$).

Procedînd la fel ca în cazul ordonării feromagnetice, dar luînd în considerație și interacția dintre cele două subrețele magnetice, vom caracteriza sistemul printr-un hamiltonian de forma

$$\hat{H} = 2J \sum_{ij} S_{1i} \cdot S_{2j} - 2\mu_0 \mu_B H \sum_i (S_{1i}^z + S_{2i}^z). \quad (11.6.51)$$

Pentru legea de dispersie se vor obține în acest caz două ramuri, date de expresiile

$$\omega_{k,\pm} = \frac{1}{\hbar} [4z^2 J^2 - 4J^2 S^2 (\sum e^{ik \cdot R_n})^2]^{1/2} \pm 2\mu_0 \mu_B H. \quad (11.6.52)$$

Desigur, în toate cazurile, feromagnetic, antiferomagnetic și ferimagnetic, din legile de dispersie ale undelor de spin se pot obține imediat expresii pentru energia excitațiilor cuantificate ale sistemului de spini, respectiv energia cuantelor undelor de spin, care au primit denumirea de *magnoni*. (Magnonii sînt corpusculi fără masă de repaus, la fel ca fononii; ei au spin întreg și fac parte din clasa bosonilor, încrîindu-se în clasa „cvasiparticulelor” — termen consacrat reprezentărilor de tip corpuscular ale excitațiilor elementare din solid.)

Teoriile cuantice ale fenomenelor magnetice din structuri cu ordine magnetică înlocuiesc variabilele dinamice semiclasice cu operatori cuantici corespunzători, ecuațiile de mișcare fiind scrise apoi cu ajutorul acestor operatori, folosind adesea limbajul parantezelor Poisson cuantice. Așa, de exemplu, în locul variabilei \hat{L}_s se va lua operatorul de spin \hat{S} (prin care se va înțelege de fapt operatorul moment cinetic de spin \hat{L}_s). Deoarece componentele carteziene ale operatorului \hat{S} nu comută între ele, dar $\langle L_s^2 \rangle = \hbar^2 S(S+1) = \text{const.}$, va fi indicat să alegem dintre operatorii \hat{S}_x , \hat{S}_y și \hat{S}_z , doi operatori independenți, care să constituie variabile cuantice independente ale sistemului. Aceștia se iau, de obicei, de forma: \hat{S}_z și $\hat{S}^\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$.

Holstein și Primakov [43] au exprimat pentru prima dată acești doi operatori prin intermediul operatorilor de creație \hat{a}^+ și de anihilare \hat{a} a magnonilor, de forma celor folosiți de către Dirac în teoria cuantică a oscilatorului liniar armonic (§ 8.8.6), obținînd expresiile

$$\begin{aligned} \hat{S}_i^+ &= (2S)^{\frac{1}{2}} \left[1 - \frac{\hat{a}_i^+ \cdot \hat{a}_i}{2S} \right]^{\frac{1}{2}} \hat{a}_i \\ \hat{S}_i^- &= (2S)^{\frac{1}{2}} \hat{a}_i^+ \left[1 - \frac{\hat{a}_i^+ \cdot \hat{a}_i}{2S} \right]^{\frac{1}{2}} \\ \hat{S}_z &= S - \hat{a}_i^+ \cdot \hat{a}_i. \end{aligned} \quad (11.6.53)$$

Desigur că în acest caz operatorul

$$\hat{n}_i = \hat{a}_i^+ \cdot \hat{a}_i \quad (11.6.54)$$

va juca rol de operator al numărului de populare cu magnoni a unei stări cuantice date. Se observă, din ultima relație (11.6.53), că odată cu creșterea numărului de magnoni dintr-o stare se reduce și magnetizarea de saturație a respectivului sistem.

Pentru stabilirea legilor de dispersie ale undelor de spin în cadrul unei tratări cuantice, se procedează în felul următor : se scrie operatorul hamiltonian \hat{H} pentru sistemul de spini, în care se includ termeni corespunzători tuturor tipurilor de interacții dintre spinii sistemului, respectiv dintre spini și rețea sau interacția cu câmpul exterior H (toți acești termeni se obțin formal din expresiile semiclasice, prin înlocuirea lui S cu \hat{S}), iar cu ajutorul unor transformări de forma (11.6.53) se urmărește obținerea unei expresii diagonalizate a operatorului hamiltonian, de forma

$$H = \sum_k \hbar \omega_k \hat{a}_k^+ \cdot \hat{a}_k. \quad (11.6.55)$$

În acest scop, de regulă, în expresiile (11.6.53) se folosesc dezvoltări în serie după puterile termenilor mici ($\hat{a}^+ \cdot \hat{a}/2S$), de forma

$$\hat{S}_i^+ = (2S)^{\frac{1}{2}} \left(\hat{a}_i - \frac{(\hat{a}_i^+ \cdot \hat{a}_i) \hat{a}_i}{4S} + \dots \right) \quad (11.6.56)$$

calculele făcându-se în diverse grade de aproximație ([112, 123]. Dacă operatorilor \hat{a}_i^+ și \hat{a}_i , definiți în nodurile rețelei cristaline, li se aplică o transformată Fourier, de forma

$$\hat{a}_i^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \hat{b}_k^+ e^{ik \cdot R_n} \quad (11.6.57)$$

$$\hat{a}_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \hat{b}_k e^{ik \cdot R_n}$$

cu scopul de a-i face operatori colectivi ai rețelei care să cuprindă și simetria acesteia, atunci operatorul hamiltonian \hat{H} va putea fi transformat la forma

$$\hat{H} = \sum_k f(k) \hat{b}_k^+ \hat{b}_k + \dots \quad (11.6.58)$$

Din rezolvarea ecuațiilor de evoluție în timp a acestor operatori

$$i\hbar \frac{d\hat{b}_k}{dt} = [\hat{b}_k, \hat{H}] \Rightarrow \dots \quad (11.6.59)$$

se obțin legile de dispersie căutate, respectiv o serie de caracteristici ale proceselor la care participă magnonii. Calculele sînt, de regulă, laborioase [112, 123] și de aceea nu vor fi expuse aici. Ele permit însă obținerea expresiei energiei și a impulsului magnonilor; pe baza cărora se pot scrie funcțiile termodinamice (F , S , U etc.), cu care se descriu stările macroscopice (termodinamice) de magnetizare ale sistemului. Distribuția magnonilor într-o astfel de stare de echilibru va fi o distribuție de tip Bose-Einstein, de forma (9.6.1). Printr-un procedeu de acest fel s-a putut demonstra că în cazul corpurilor cu ordonare feromagnetică, magnetizarea de saturație variază cu temperatura după o lege de forma (6.8.112), scăderea

magnetizării de saturație odată cu creșterea temperaturii corpului fiind pusă pe seama creșterii numărului de magnoni.

De consemnat, în încheiere, că undele de spin își pot releva existența într-un corp feromagnetic și în mod direct, în cadrul fenomenului de *rezo-*

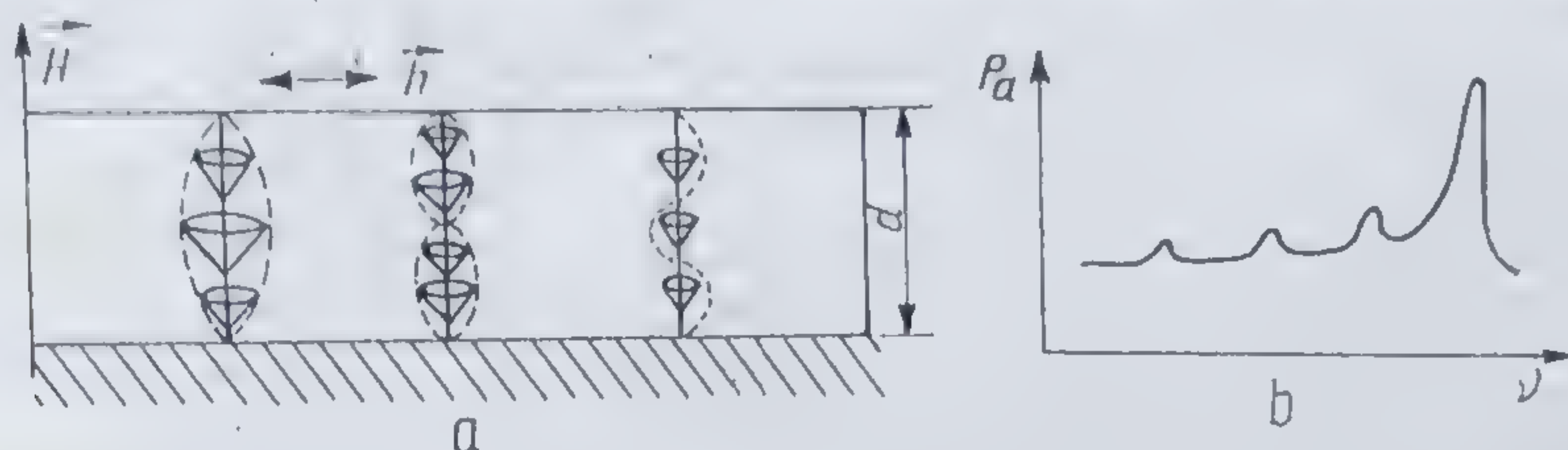


Fig. 11.6.4

nanță a undelor staționare de spin. Acest fenomen a fost prevăzut teoretic de către Ch. Kittel [56] și descoperit experimental, la scurt interval de timp, de către Seavey și Tannenwald [109] în studii de *rezonanță feromagnetică pe straturi subțiri* magnetice.

În figura 11.6.4 este schițată configurația de bază a unui astfel de experiment în care un strat subțire este supus acțiunii concomitente a unui câmp magnetic static H , orientat perpendicular pe suprafața stratului și a unui câmp magnetic de înaltă frecvență h (din domeniul microundelor) conținut în planul stratului.

Acest câmp de microunde va crea perturbații în sistemul de spini orientați de către H în lungul direcției acestuia, perturbații care constau în apariția unor unde de spin staționare, al căror regim de suprafață este generat de câmpuri de anizotropie superficială, care fixează spinii de pe cele două fețe ale stratului. Se observă de pe figură că se va obține o undă fundamentală, cu $\lambda = 2d$ (d fiind grosimea stratului) și o serie de armonici superioare, cu lungimi de undă $\lambda_n = \frac{\lambda}{n}$. De fiecare dată când frec-

vența microundei va coincide cu una dintre frecvențele corespunzătoare sistemului de unde staționare ν_n , se va realiza o absorbție de rezonanță, care se va evidenția prin picuri de rezonanță (fig. 11.6.4, b). Din studiul acestor spectre de rezonanță a undelor de spin se poate determina integrala de schimb J , precum și dependența ei de temperatură și compoziție [46 — 48].

§ 11.7. PROPRIETĂȚI OPTICE LA SOLID

Proprietățile optice ale solidului sînt determinate, aproape în exclusivitate, de starea energetică a electronilor din structura cristalină a solidului. De exemplu, inexistența benzii interzise la metale determină atât reflexia metalică a luminii din domeniul vizibil, cît și absorbția globală (neselectivă) a acesteia, în virtutea unui transfer integral al energiei radia-

ției către electronii cvasiliberi din metal. În schimb prezența unei benzi interzise, de lărgime E_g , la structurile semiconductoare și dielectrice oferă acestor structuri proprietăți de absorbție și transmisie selectivă ale radiațiilor luminoase.

Condiția ca radiația luminoasă din domeniul vizibil să-și poată transfera energia unui electron, promovându-l dintr-o bandă de valență într-una de conducție este ca lărgimea E_g a benzii interzise ce le separă să nu depășească intervalul de valori $E_g = 1,7 - 3,5$ eV. În aceste condiții cristalul de CdS, pentru care $E_g = 2,4$ eV, va absorbi culoarea albastră din spectrul vizibil și în consecință va prezenta o colorație galben-portocalie; diamantul, pentru care $E_g = 5,4$ eV, va fi transparent pentru domeniul vizibil, iar germaniul ($E_g = 0,11$ eV) va fi transparent doar în infraroșu.

Unele cristale prezintă o interesantă colorație datorită prezenței în structura lor a impurităților de substituție, care formează, așa cum s-a văzut în § 10.2.6, *centre de culoare*. Rubinel, de exemplu, prezintă culoarea roșie caracteristică, datorită ionilor de Cr^{2+} din structura monocristalului de Al_2O_3 , iar safirul, culoarea albastră, datorită prezenței ionilor de Ti^{3+} în structura aceluiași cristal. În ultima vreme, studiul nivelelor energetice ale acestor ioni de impuritate prezintă interes și pentru obținerea unor emițătoare de radiație stimulată, de tip laser (vezi § 10.4).

De o mare importanță practică se dovedesc a fi, de asemenea, impuritățile activatoare din punct de vedere optic. Rolul lor este similar celui al impurităților donoare și acceptoare din cazul semiconductoarelor ele creînd nivele atomice situate în cadrul benzii interzise ce separă banda de valență de banda de conducție (fig. 11.7.1). Nivelul situat în imediata apropiere a benzii de valență se numește *nivel capcană*, deoarece el poate capta electroni din banda de valență a dielectricului, iar nivelul N_A , situat în imediata apropiere a limitei inferioare a benzii de conducție se numește *nivel de activare*, deoarece prin absorbție de fotoni el poate dona electroni benzii de conducție BC .

În cristale de acest tip intervin procese de absorbție a luminii, urmate de procese de reemisie, uneori cu modificarea compoziției spectrale a radia-

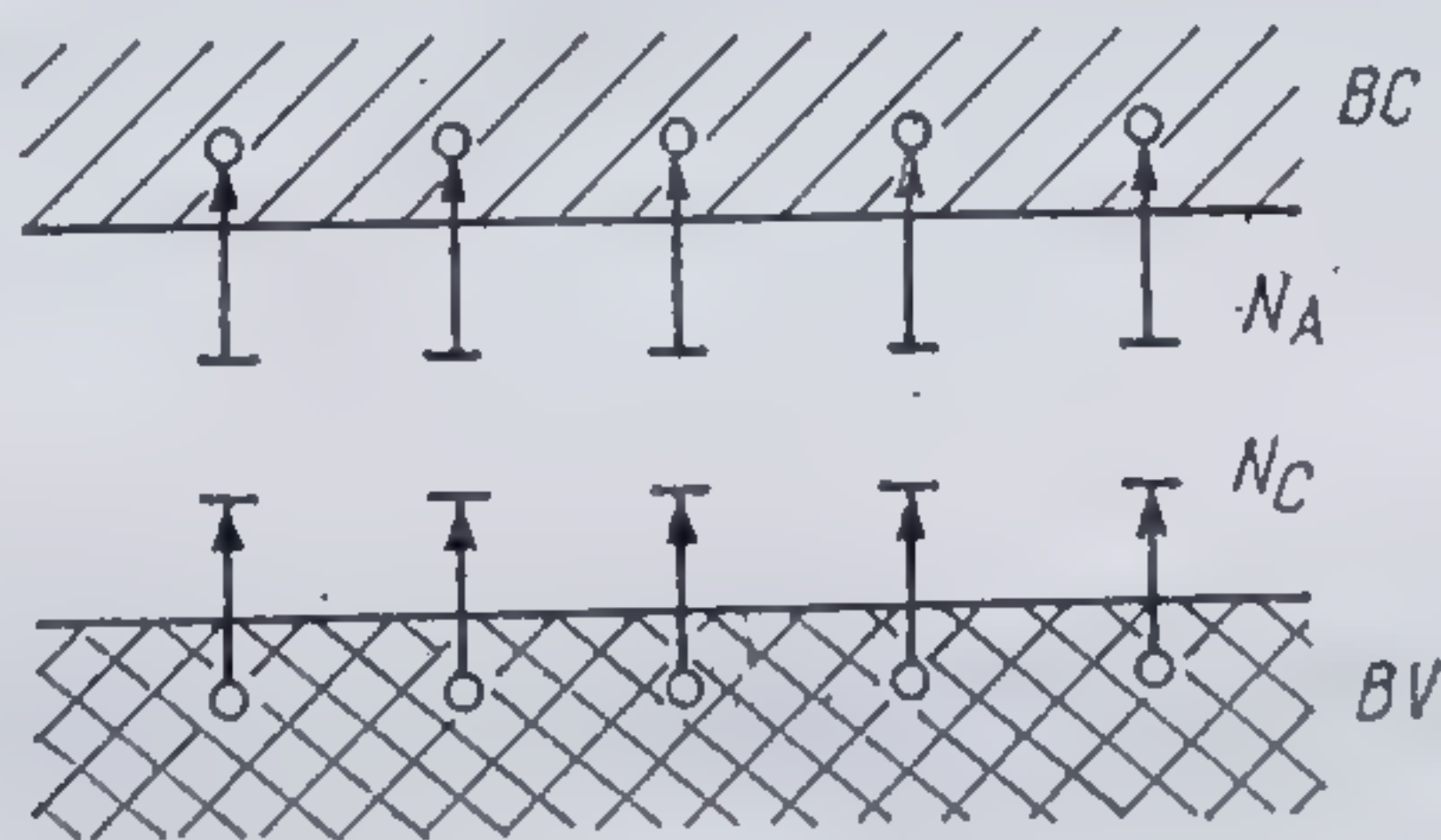


Fig. 11.7.1

ției incidente. Dacă reemisია succede absorbției la intervale de timp $\Delta t < 10^{-8}$ s, atunci avem de a face cu *proces de luminiscență*, iar dacă $\Delta t > 10^{-8}$ s, cu *proces de fosforescență*. Luminiscența și fosforescența, numite generic *fenomene de fluorescență*, nu sînt procese de echilibru termic și, de

aceea, radiația emisă în cadrul lor nu este o radiație de echilibru, cu spectru continuu.

Proprietăți interesante de fluorescență dobîndesc halogenurile impurificate cu diverse tipuri de ioni metalici. De exemplu, dacă o parte dintre ionii de potasiu (K^+), din cristalul de KCl, sînt înlocuiți cu ioni de taliu (Tl^+) se obține un cristal de clorură de potasiu activată cu taliu, care se utilizează în realizarea fotomultiplicatorilor, tocmai datorită proprietăților de fluorescență pe care acest cristal le prezintă.

§11.8. EFECTE ÎNCRUCIȘATE ÎN SOLID

Sub această denumire sînt cuprinse o serie de efecte care se produc într-un corp solid, sub acțiunea concomitentă a mai multor cîmpuri de forțe exterioare, de naturi diferite. Există, astfel, efecte *galvano-magnetice* (sub acțiunea concomitentă a unor cîmpuri electrice și magnetice), efecte *termo-electrice* (cîmpuri termice, date de gradienti de temperatură și cîmpuri electrice), efecte *foto-magneto-electrice* etc. Majoritatea acestor efecte oferă metode extrem de precise pentru studiul solidului și, de aceea, vom face o succintă prezentare a lor.

1. **Efecte galvanomagnetice.** Din această clasă fac parte: efectul *Hall*, efectul *magneto-rezistiv*, efectul *Ettingshausen* (efect galvanomagnetic transversal) și efectul *Nernst* (efect galvanomagnetic longitudinal). Toate aceste efecte sînt determinate de acțiunea forței Lorentz (6.1.3) asupra purtătorilor liberi sau cvasiliberi de sarcină electrică din solid, deci apar în prezența a două cîmpuri de forțe statice, cîmpul electric \mathbf{E} și cîmpul de inducție magnetică \mathbf{B} , orientat perpendicular pe \mathbf{E} .

a) *Efectul Hall.* În prezența a două cîmpuri \mathbf{B} și \mathbf{E} reciproc perpendiculare, în proba străbătută de curentul electric $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$ se creează o tensiune Hall U_H , respectiv un cîmp electric Hall \mathbf{E}_H , orientat perpendicular

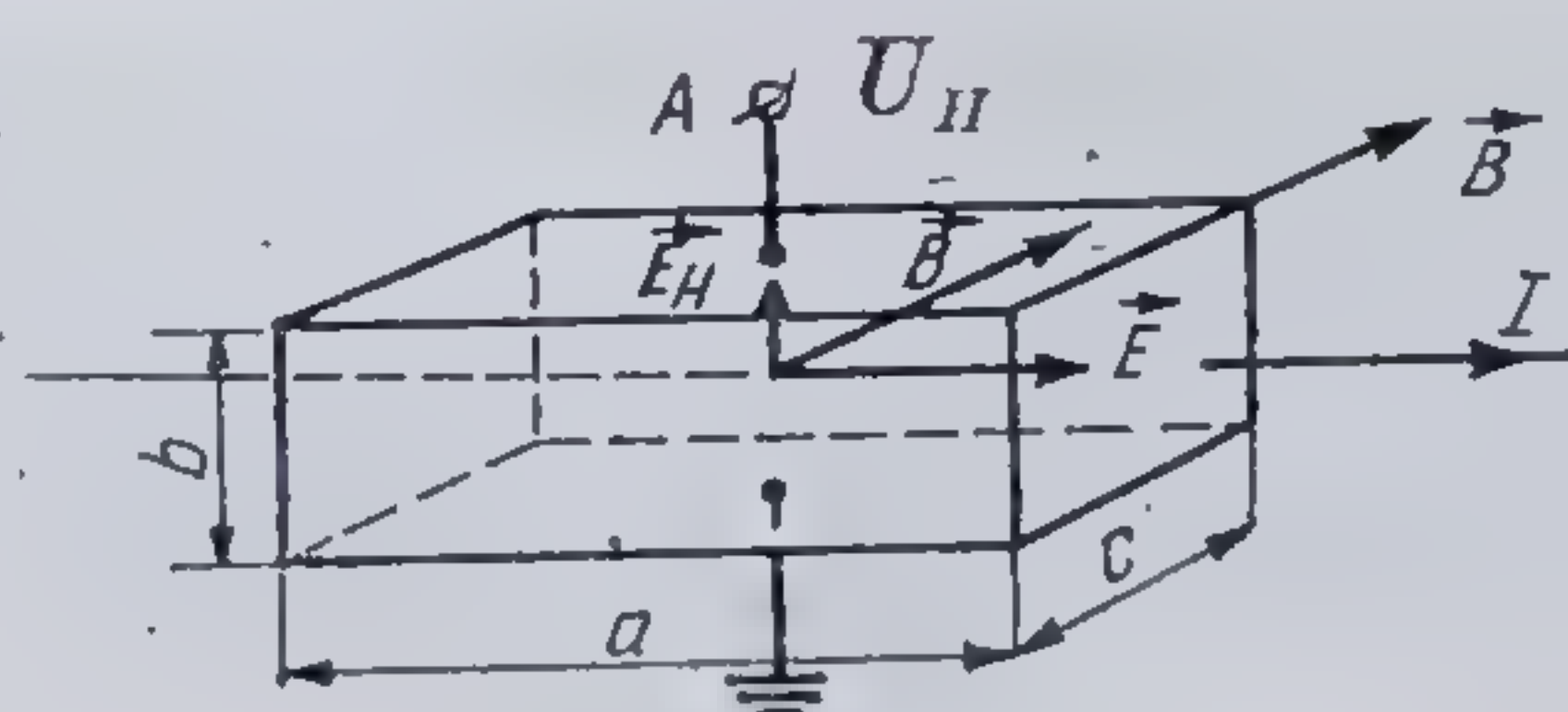


Fig. 11.8.1

pe planul determinat de \mathbf{E} și \mathbf{B} (fig. 11.8.1). Cauza apariției acestei tensiuni o constituie acțiunea forței Lorentz

$$\mathbf{F}_L = e(\mathbf{v}_D \times \mathbf{B}) \quad (11.8.1)$$

asupra purtătorilor de sarcină e , care se deplasează cu o viteză de drift v_D , dată de expresia (vezi (6.7.8) și (6.7.48))

$$v_D = \mu E = \frac{e\tau}{m^*} E \quad (11.8.2)$$

Pentru simplitate, am admis aici că masa efectivă a purtătorilor de sarcină este un scalar.

Desigur, sub acțiunea forței F_L (al cărei sens se observă că nu depinde de semnul sarcinii electrice a particulelor, întrucât $F_L = \frac{e^2\tau}{m^*} (E_L \times B)$) atât electronii cât și golurile vor fi acționate spre aceeași față a probei, conferind bornei A , de exemplu, o polaritate pozitivă sau negativă, după cum este vorba de goluri sau de electroni de conducție. În condiții de regim staționar acțiunea forței F_L va fi anulată, la un anumit moment, de acțiunea unei forțe electrice

$$F_H = -eE_H = \frac{e^2\tau}{m^*} (B \times E) \quad (11.8.3)$$

deci de acțiunea unui câmp Hall, E_H , dat de expresia

$$E_H = \frac{e\tau}{m^*} (B \times E). \quad (11.8.4)$$

Avînd în vedere și legea diferențială Ohm (6.7.9), putem scrie

$$E_H = \frac{e\tau}{m^*} \frac{1}{\sigma} (B \times J) = R_H (B \times J). \quad (11.8.5)$$

Mărimea

$$R_H = \frac{\mu}{\sigma} = \frac{1}{ne} \quad (11.8.6)$$

reprezintă așa-numita *constantă Hall*. Ea este dată de numărul de purtători n din unitatea de volum și de sarcina e a acestora [79], fiind influențată și de tipul mecanismelor de ciocnire dintre purtătorii de sarcină și rețeaua cristalină. Formula (11.8.6) este valabilă numai pentru cazul metalelor pure, în general R_H fiind dată de o relație de forma :

$$R_H = \frac{A}{ne} \quad (11.8.7)$$

în care $A = \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} = \frac{2\pi}{8}$, pentru cazul difuziei pe fononi termici și $A = 315\pi/512$, în cazul difuziei pe ioni de amestec [55, 79].

Constanta Hall R_H se poate determina ușor, măsurînd tensiunea Hall U_H . Pentru un aranjament experimental ca cel schițat în figura 11.8.1, se obține

$$U_H = E_H b = R \frac{BI}{c} \quad (11.8.8)$$

neglijîndu-se unghiul Hall φ , dat de $\tan \varphi = \frac{E_H}{E} \simeq 0$, ceea ce înseamnă că s-a presupus o situație în care $|\mathbf{E}| \gg |\mathbf{E}_H|$. Din panta dreptei $U_H = f(I)$ se determină R_H și respectiv densitatea volumică a purtătorilor de sarcină din solid și semnul sarcinii acestora.

b) *Efectul magnetorezistiv* constă în variația rezistivității electrice ρ , a unui solid, în prezența cîmpurilor magnetice. Această variație este cauzată de faptul că prezența unui cîmp de inducție \mathbf{B} afectează valoarea liberului parcurs $\langle l \rangle$ al purtătorilor de sarcină. Într-adevăr, dacă notăm prin $\langle l_0 \rangle$ liberul parcurs mediu al particulelor în lipsa cîmpului \mathbf{B} , atunci în prezența acestuia — întrucît traiectoria respectivei microparticule va fi curbată cu unghiul mic φ (fig. 11.8.2) — vom putea scrie

$$\langle l \rangle = \langle l_0 \rangle \cos \varphi \simeq \langle l_0 \rangle \left(1 - \frac{1}{2} \varphi^2 \right) \quad (11.8.9)$$

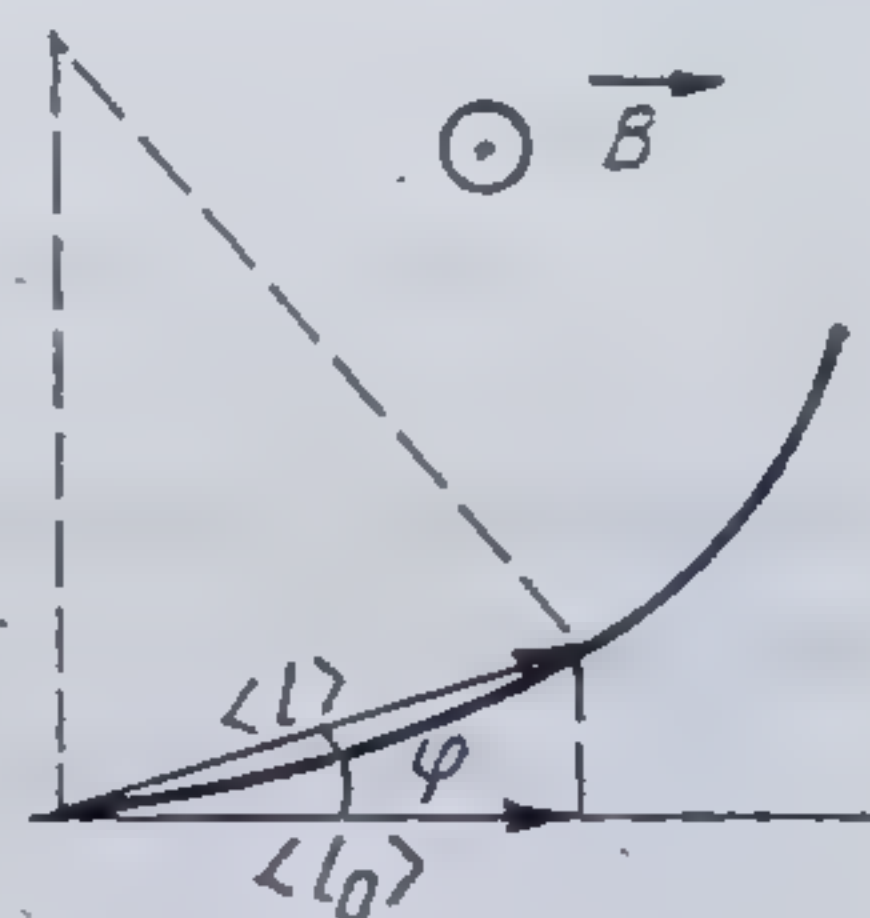


Fig. 11.8.2

Dar, potrivit celor discutate mai sus

$$\tan \varphi = \frac{E_H}{E} = RB\sigma = \mu B; \Rightarrow \varphi \simeq \mu B \quad (11.8.10)$$

și deci avem

$$\langle l \rangle = \langle l_0 \rangle \left(1 - \frac{1}{2} \mu^2 B^2 \right) \quad (11.8.11)$$

În § 6.7 s-a arătat că rezistivitatea electrică depinde invers proporțional de $\langle l \rangle$, astfel încît, pentru cîmpuri \mathbf{B} nu prea mari, se poate scrie :

$$\rho_B = \rho_0 (1 + CB^2) \quad (11.8.12)$$

rezultat bine verificat de experiență, pentru probe metalice.

c) *Efectul Ettingshausen* (efect galvano-magneto-termic transversal) constă într-o separare, pe cele două fețe ale probei de pe care se ia tensiunea Hall (vezi fig. 11.8.1), a purtătorilor de sarcină cu viteze de drift diferite; cei cu viteze v_D mari vor ajunge pe una din fețe, iar cei cu viteze v_D mici, pe cealaltă față. Datorită acestui fapt, între cele două fețe se va crea un gradient termic ∇T , dat de expresia

$$\nabla T = A_E (\mathbf{J} \times \mathbf{B}) \quad (11.8.13)$$

A_E fiind constanta Ettingshausen a efectului.

d) *Efectul Nernst* (efect galvano-magneto-termic longitudinal) constă în apariția unui gradient termic în lungul lui \mathbf{J} , tot datorită separării purtătorilor de sarcină „mai calzi” (cei ce au viteze de drift mai mari), de cei „mai reci”.

2. **Efecte termoelectrice.** Din această clasă fac parte efectele Seebeck, Peltier și Thomson.

a) *Efectul Seebeck* constă în apariția unei tensiuni termoelectromotoare \mathcal{E}_{12} , într-un circuit electric închis, format din două metale diferite,

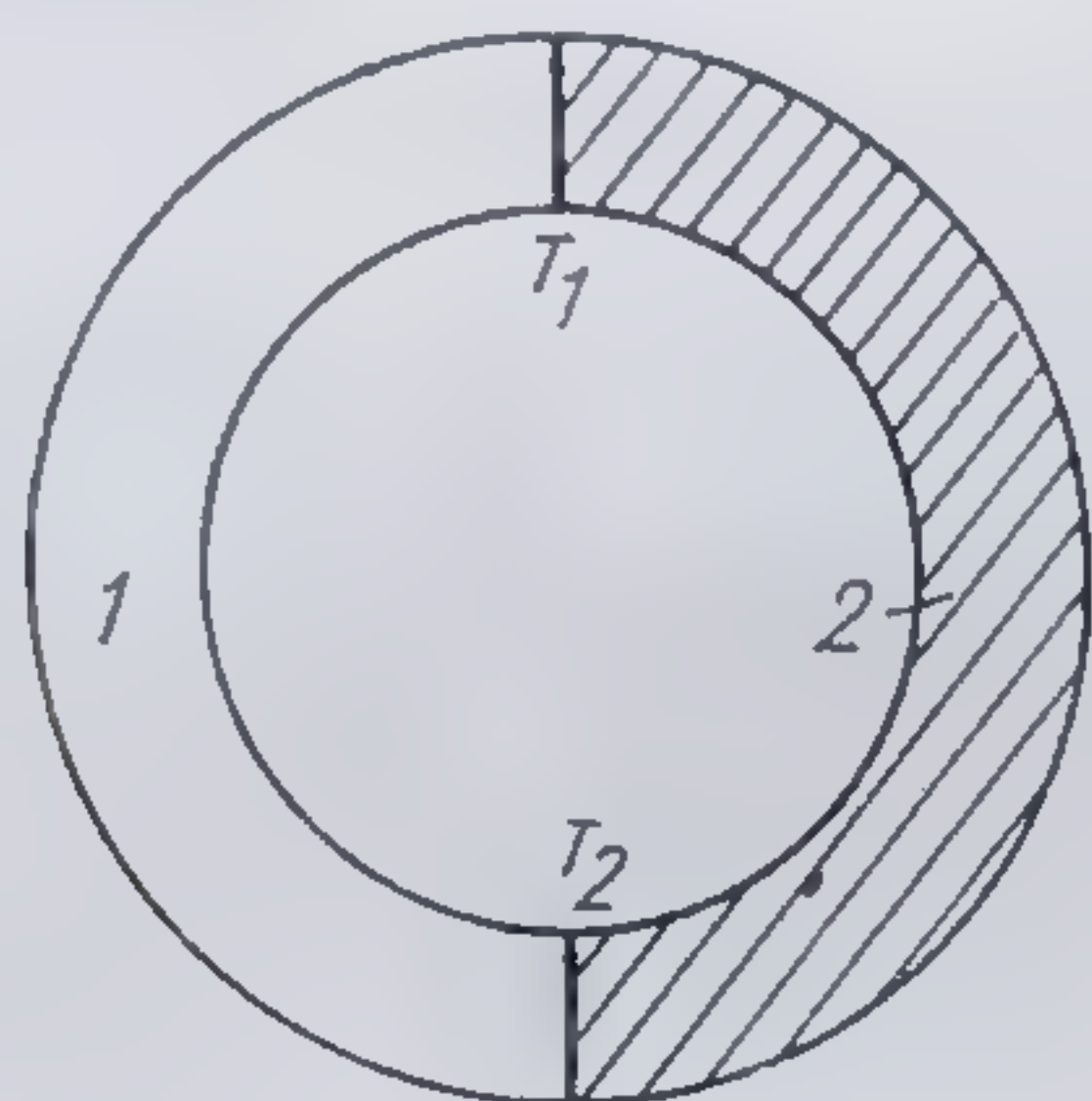


Fig. 11.8.3

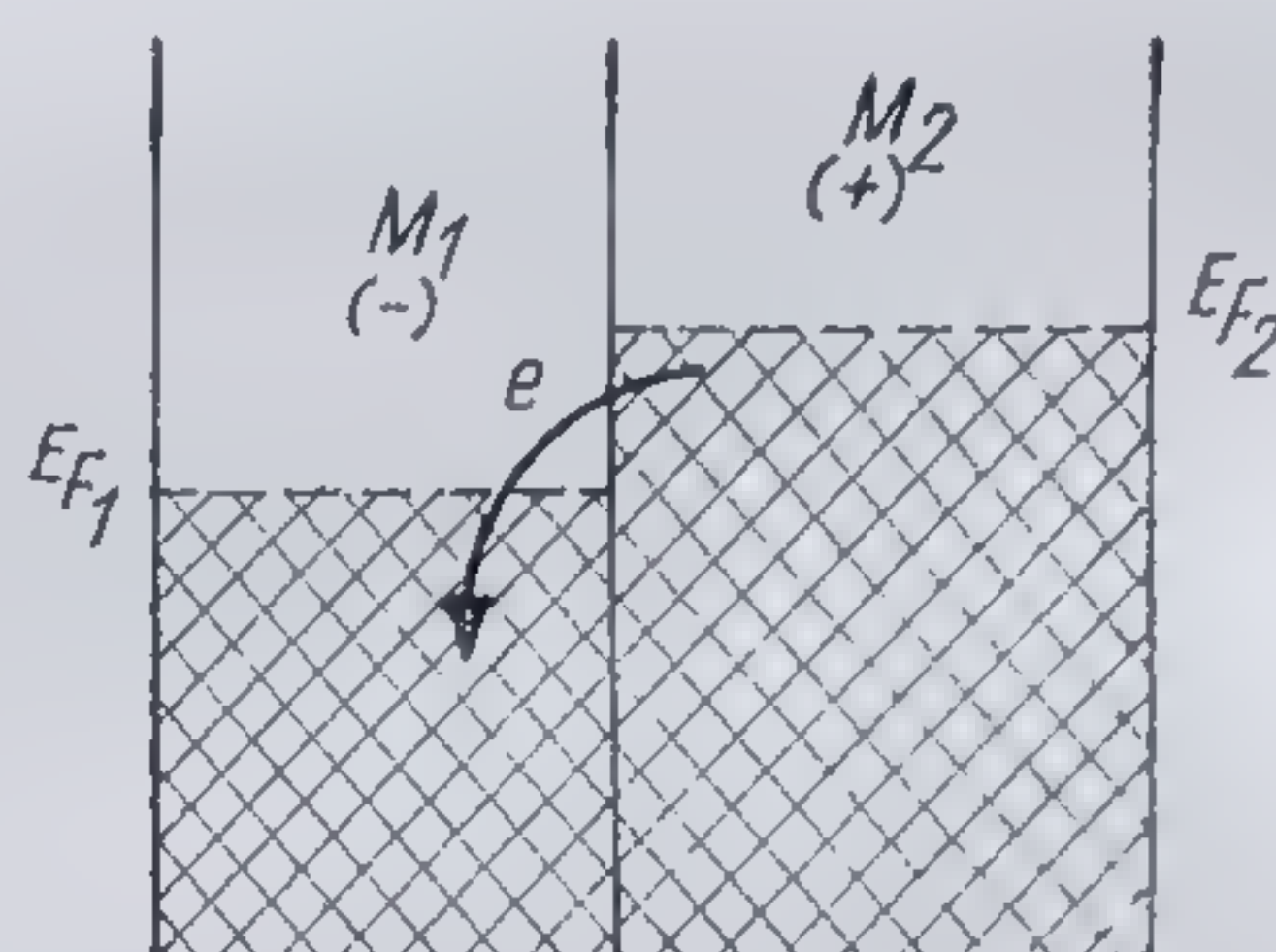


Fig. 11.8.4

sudate între ele (fig. 11.8.3), dacă una dintre suduri este menținută la o temperatură T_1 mai ridicată decât temperatura T_2 a celeilalte suduri.

Valoarea tensiunii termoelectromotoare va depinde de diferența dintre cele două temperaturi

$$\mathcal{E}_{12} = \int_{T_1}^{T_2} \alpha(T) dT = \alpha(T_2 - T_1) \quad (11.8.14)$$

întrucât pe intervale nu prea mari de temperatură $\alpha(T) \simeq \alpha = \text{const.}$

Efectul Seebeck apare datorită faptului că cele două metale sudate, posedând nivele Fermi de energii diferite ($E_{F1} \neq E_{F2}$), își egalează prin sudare aceste nivele în urma unui transfer de electroni dinspre metalul cu E_F mai mare spre cel cu E_F mai mic (fig. 11.8.4). Ca urmare a acestui transfer apare o diferență de potențial de contact, metalul M_2 încărcându-se pozitiv, iar metalul M_1 negativ. Încălzind unul din contacte, în acesta va spori numărul de purtători de sarcină, dar ei vor fi obligați să circule tot dinspre M_2 spre M_1 , astfel încât în circuit va lua naștere un curent termoelectric, generat de \mathcal{E}_{12} .

b) *Efectul Peltier* descrie un fenomen invers efectului Seebeck și constă în apariția unei diferențe de temperatură între cele două suduri metalice, dacă prin circuit circulă un curent continuu. Înseamnă că într-una din suduri se degajă, în regim staționar, căldura Q , iar în cealaltă se absoarbe aceeași cantitate de căldură Q , dată de o expresie de forma

$$Q = P_{12} I \cdot t \quad (11.8.15)$$

P_{12} fiind constanta Peltier. Efectul prezintă interes pentru realizarea unor termostate cu temperatură reglabilă și controlabilă.

c) *Efectul Thomson* apare în materiale semiconductoare și constă în absorbție sau degajare de căldură într-un corp semiconductor, în funcție de sensul de trecere a curentului electric prin probă, dacă în lungul acesteia proba are un anumit gradient termic.

Efectul se datorește faptului că gradientul termic ∇T creează, prin intermediul curentului electric de difuzie termică, un câmp electric suplimentar E_D , iar acesta poate fi paralel sau antiparalel cu câmpul E care generează respectivul curent. În primul caz corpul cedează căldură, iar în al doilea, absoarbe căldura

$$Q = T_h(\nabla T \cdot \mathbf{J})\Delta t \cdot \Delta V \quad (11.8.16)$$

T_h fiind constanta Thomson.

3. **Efecte termomagnetice.** Din această clasă de efecte, care apar în lipsa câmpului electric E , fac parte: *efectul Righi-Leduc* și *efectul Madji-Righi-Leduc*. Ambele apar în materiale semiconductoare și se datoresc separării purtătorilor de sarcină cu diverse viteze de drift v_D , în lungul probei, sub acțiunea unui câmp de inducție magnetică B . Primul efect constă în apariția unui gradient termic ∇T , cauzat de această separare a purtătorilor de sarcină electrică mai calzi de cei mai reci, iar al doilea — în schimbarea conductibilității termice pe direcția gradientului ∇T (va apare un gradient termic longitudinal suplimentar).

4. **Efecte fotovoltaice.** Unul dintre efectele fotovoltaice, care a jucat un rol deosebit în dezvoltarea concepțiilor cuantice despre structura intimă a materiei, este *efectul fotoelectric extern*, prezentat în § 8.2. În semiconductor se poate produce un *efect fotoelectric intern*, respectiv trecerea purtătorilor de sarcină printr-o joncțiune $p-n$ sub acțiunea luminii. Sub acțiunea luminii materialele semiconductoare își modifică coeficientul de conducție σ (dispozitive fotoconductive), dar cele cu joncțiune $p-n$ pot genera și o anumită tensiune electromotoare (dispozitive fotovoltaice). Dispozitivele fotovoltaice prezintă interes deosebit în problema conversiei energiei solare în energie electrică. În sfârșit, în semiconductor există și un efect fotomagnetoelectric, care constă în inducerea unei tensiuni electromotoare pe direcție normală la acțiunea câmpului B și la direcția de propagare a luminii în proba semiconductoare respectivă.

§ 11.9. NOȚIUNI DE FIZICA SUPRAFETEI

Lămița de separație solid-gaz, respectiv solid-lichid, prezintă interes din multe puncte de vedere, atât teoretice cât și practice și de aceea a început să fie intens studiată în ultima vreme. Problematika unui astfel de studiu, care vizează atât caracterizarea din punct de vedere fizic a suprafeței unui solid, cât și descrierea proceselor superficiale ce se pot produce pe astfel de suprafețe, s-a articulat într-un domeniu relativ autonom, numit *fizica suprafeței*.

Este de așteptat, desigur, ca simetria la nivelul suprafeței unui solid — mai scăzută decât cea din interiorul său — să determine o serie de proprietăți și procese fizico-chimice specifice suprafeței, deosebite de cele ale celor două faze volumice pe care le separă. Caracterizarea acestor procese, atât la nivelul microscopic, cât și la nivel macroscopic, este de mare importanță pentru descrierea multor fenomene de suprafață, cum sînt: schimbul de căldură și conducția electrică prin suprafețe metalice; adsorbția și desorbția superficială a atomilor și moleculelor; anizotropia magnetică superficială și fenomenele de „pinning” (fixare a spinilor superficiali); undele de spin superficiale etc. Într-un context mai larg, suprafețele solide, prezintă interes și din punct de vedere al fricțiunii (umede sau uscate), coroziunii și protecției suprafețelor metalice, al durității superficiale, conversiei energiei solare și în general al interacției radiațiilor cu suprafața solidului, difuziei și segregăției superficiale a altor faze, catalizei eterogene, creșterii monocristalelor din faze lichide sau gazoase, tratamentului termic al suprafețelor etc. În ultimele două-trei decenii s-au depus eforturi considerabile pentru a înțelege și stăpîni desfășurarea acestor fenomene.

Din punct de vedere termodinamic, suprafața unui solid trebuie privită ca fiind stratul de grosime finită (fig. 11.9.1) în care intervin procese și fenomene specifice, distincte și independente de ale celor două faze volumice pe care le separă. Unii dintre parametrii macroscopici suferă o variație continuă de la o fază la alta, așa cum se arată pe figura 11.9.1 pentru

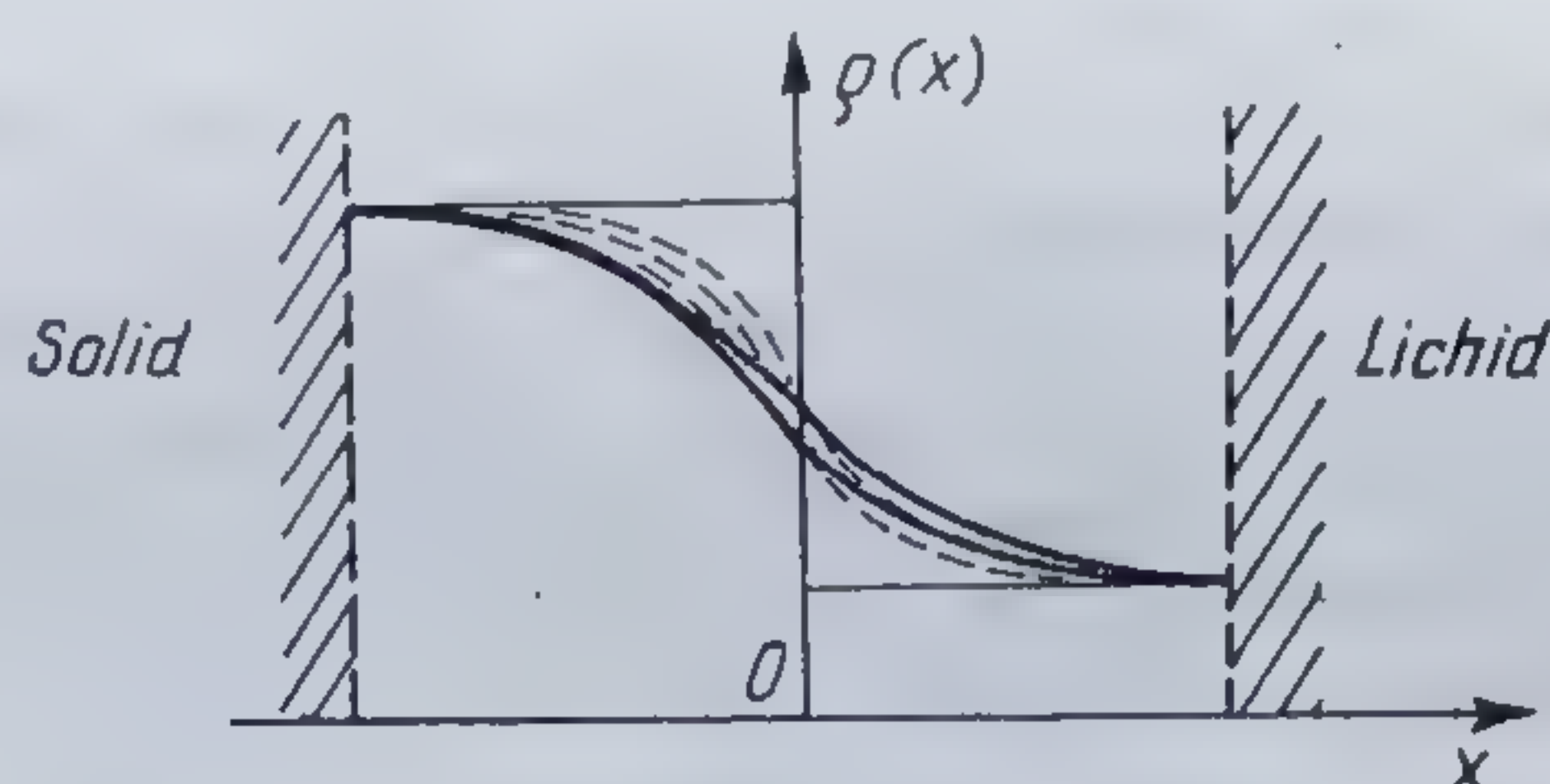


Fig. 11.9.1.

densitatea $\rho(x)$. Din aceste motive suprafața de separație este, din punct de vedere termodinamic, o fază distinctă care se numește adesea *fază de interfață*.

De remarcat că, la nivel microscopic, suprafața geometrică a unui solid prezintă multiple neregularități, cum sînt terasele, treptele, încrețiturile, vacanțele, atomii și moleculele adsorbite etc. (fig. 11.9.2), care ex-

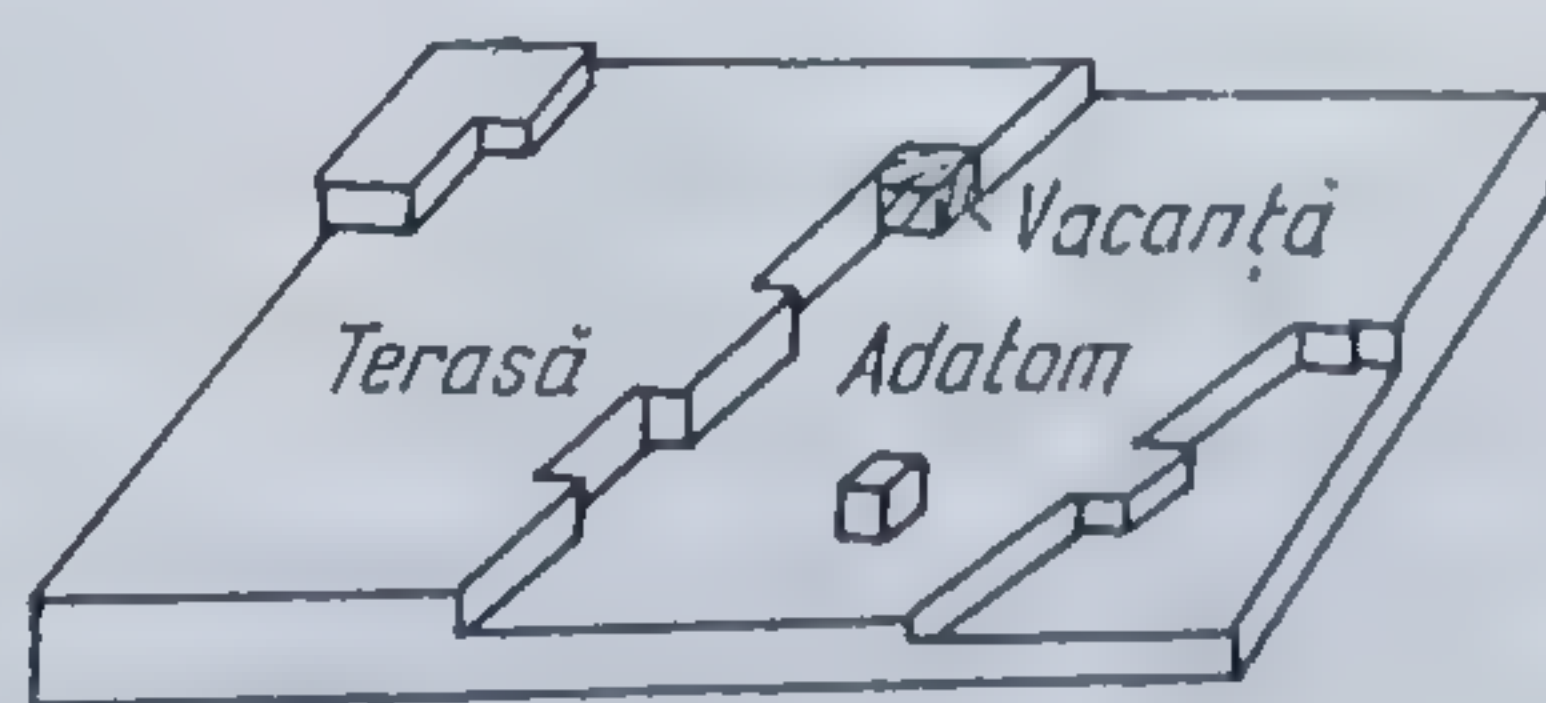


Fig. 11.9.2

clud posibilitatea realizării unui echilibru microscopic, tocmai datorită difuziei superficiale a acestor defecte. La nivel macroscopic se admite existența unei stări de echilibru termodinamic (într-o primă aproximație) și pe baza acestei ipoteze se obțin informații interesante (așa cum a arătat pentru prima dată Gibbs [37]), asupra fenomenelor de tensiune superficială, de adsorbție, desorbție și de difuzie superficială. Descrierea termodinamică a acestor procese se bazează pe introducerea unor parametri intensivi de stare, caracteristici suprafeței de separație dintre două faze volumice (numită și suprafață gibbsiană). Cu ajutorul primelor două principii ale termodinamicii se obțin ecuații de stare care guvernează respectivele procese. Vom exemplifica succint această metodă.

Fenomenele de tensiune superficială sînt descrise, așa cum s-a arătat în § 4.2, de coeficientul de tensiune superficială σ , pe care îl vom defini aici prin energia liberă superficială F_σ ce revine în condiții de echilibru termostatat ($T = \text{const.}$), unității de arie A a respectivei suprafețe, adică

$$\sigma = \left(\frac{\partial F_\sigma}{\partial A} \right)_T. \quad (11.9.1)$$

Mărimea σ , fiind un parametru fenomenologic, va putea fi determinată experimental. S-au găsit, în cazul metalelor, valori cuprinse între 1 N/m și 5 N/m, în funcție de tipul metalului respectiv ($\sigma_{\text{Cr}} = 5 \text{ N/m}$; $\sigma_{\text{W}} = 3 \text{ N/m}$, $\sigma_{\text{Sn}} = 1 \text{ N/m}$ etc.). Aceste valori depind de temperatură, potrivit relației

$$\frac{1}{\sigma_m} \frac{d\sigma}{dT} = -\gamma, \quad \gamma \simeq 2 \cdot 10^{-5} \text{K}^{-1} \quad (11.9.2)$$

σ_m fiind coeficientul de tensiune superficială la temperatura de topire. În general, σ_m este cu 20 ÷ 25 % mai mic decît σ la temperatura camerei (σ_m fiind în același timp și coeficientul de tensiune superficială a metalului topit).

În cazul monocristalelor s-a constatat că σ este cu atît mai mare cu cît simetria feței respective este mai mică, deci cu cît indicii Miller ai respectivei suprafețe au valori mai mari.

În cazul suprafețelor cu mai multe componente, care din punct de vedere termodinamic realizează sistemul cu cantitate variabilă de substanță (vezi § 4.4), în conformitate cu prima relație din (4.4.7) vom putea scrie

$$dF_\sigma = -S_\sigma dT - p_\sigma dV + \sigma dA + \sum_i \mu_i d(\Gamma_i A_i) \quad (11.9.3)$$

în care S_σ reprezintă entropia superficială, p_σ presiunea capilară, μ_i potențialul chimic corespunzător componentei „i”, iar prin

$$\Gamma_i = \frac{N_i^\sigma}{A} \quad (11.9.4)$$

s-a notat numărul de atomi (molecule) N_i^σ , din componenta „i”, adsorbiți pe unitatea de arie A a stratului superficial.

Se poate arăta [80] că din relația (11.9.3), rezultă

$$S_\sigma dT + A d\sigma + A \sum_i \Gamma_i d\mu_i = 0 \quad (11.9.5)$$

ceea ce înseamnă că în condiții de termostatare se obține

$$\Gamma_i = - \left(\frac{\partial \sigma}{\partial \mu_i} \right)_T \quad (11.9.6)$$

Această relație este cunoscută sub denumirea de *formula de adsorbție Gibbs*. Întrucât, la presiuni nu prea mari, pentru suprafețe cu două componente se poate scrie

$$\mu = \mu_0 + RT \ln p_2/p_1, \quad (11.9.7)$$

din (11.9.6) se va obține expresia

$$\Gamma_2 = - \frac{1}{RT} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial \ln p_2} \right)_T \quad (11.9.8)$$

care pune în evidență o scădere a lui σ cu creșterea presiunii. Rezultă deci, că în stratul superficial se vor aglomera acele componente care produc o micșorare a lui σ , denumite și componente *superficial-active*.

În ceea ce privește difuzia superficială, proces care la scară macroscopică face parte din clasa proceselor termodinamice ireversibile (§4.6), aceasta va putea fi descrisă printr-o lege de tip Fick (4.6.13), în care însă va interveni un coeficient de difuzie superficială D_s , diferit de cel de difuzie volumică D . Explicitarea acestei diferențe, ca și a altor aspecte ale mecanismelor și proceselor superficiale mai sus menționate, face apel la studii microscopice. Ele sînt condiționate, în principiu, de structura atomică și electronică superficială a solidului.

Structura cristalină a solidului se modifică în mod sensibil spre suprafața sa, întrucît rețeaua cristalină tridimensională trece treptat într-o rețea bidimensională. Acest lucru afectează spectrul energetic al tuturor microparticulelor din solid și, implicit, structura de bandă a acestui spectru. Se știe că la suprafața unui solid intervine o barieră de potențial, care este evidențiată de existența lucrului de extracție a electronilor de conducție din metale (fig.11.9.3). De aceea, electronii nu pot părăsi suprafața solidului.

Dar, așa cum a arătat pentru prima dată E. Tamm [41], electronii superficiali nu se pot deplasa ușor nici spre interiorul structurii cristaline (chiar dacă sînt electroni de conducție) datorită fenomenelor de difracție a undelor asociate ψ pe câmpul cristalului intern. Se vor crea, astfel, stări electronice superficiale legate a căror energie va fi diferită de cea a stărilor din interiorul structurii. În mod similar este afectat spectrul energetic al fononilor, plasmonilor, magnonilor și al altor evasiparticule din solid.

Aflarea spectrelor energetice superficiale presupune însă rezolvarea ecuației lui Schrödinger (11.3.4) în care termenul $V(r)$ se va compune dintr-un termen superficial $V_s(x)$, ales în așa fel încît să exprime caracteristicile experimentale ale barierei de potențial superficiale (vezi fig.11.9.3) și dintr-un termen $V_k(x)$, periodic în planul yOz . Condițiile la limită ciclice de tip Born-Kármán (11.3.12) trebuie de asemenea înlocuite, pe suprafața solidului, cu *condiții neciclice*. Vor interveni desigur calcule destul de

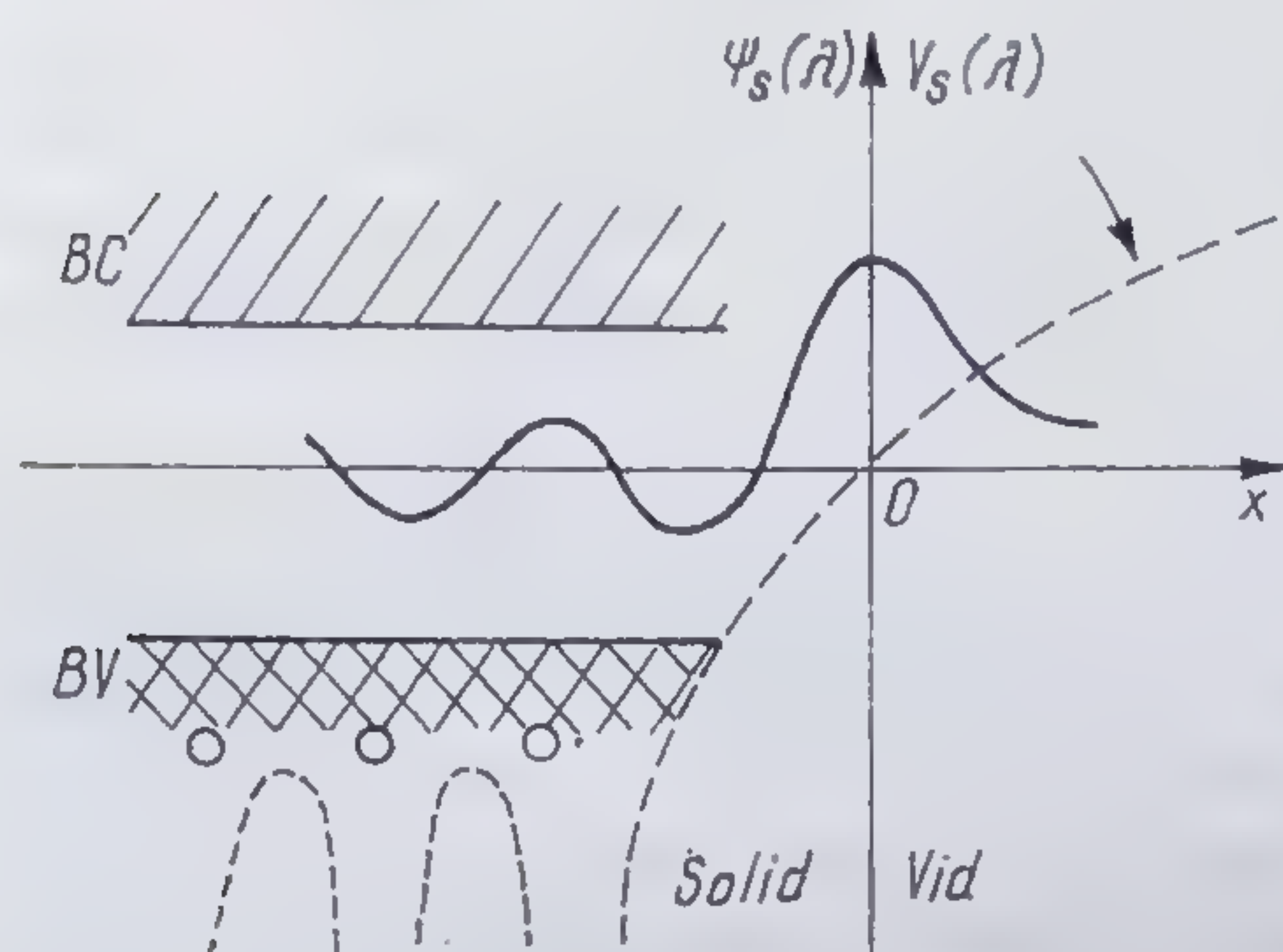


Fig. 11.9.3

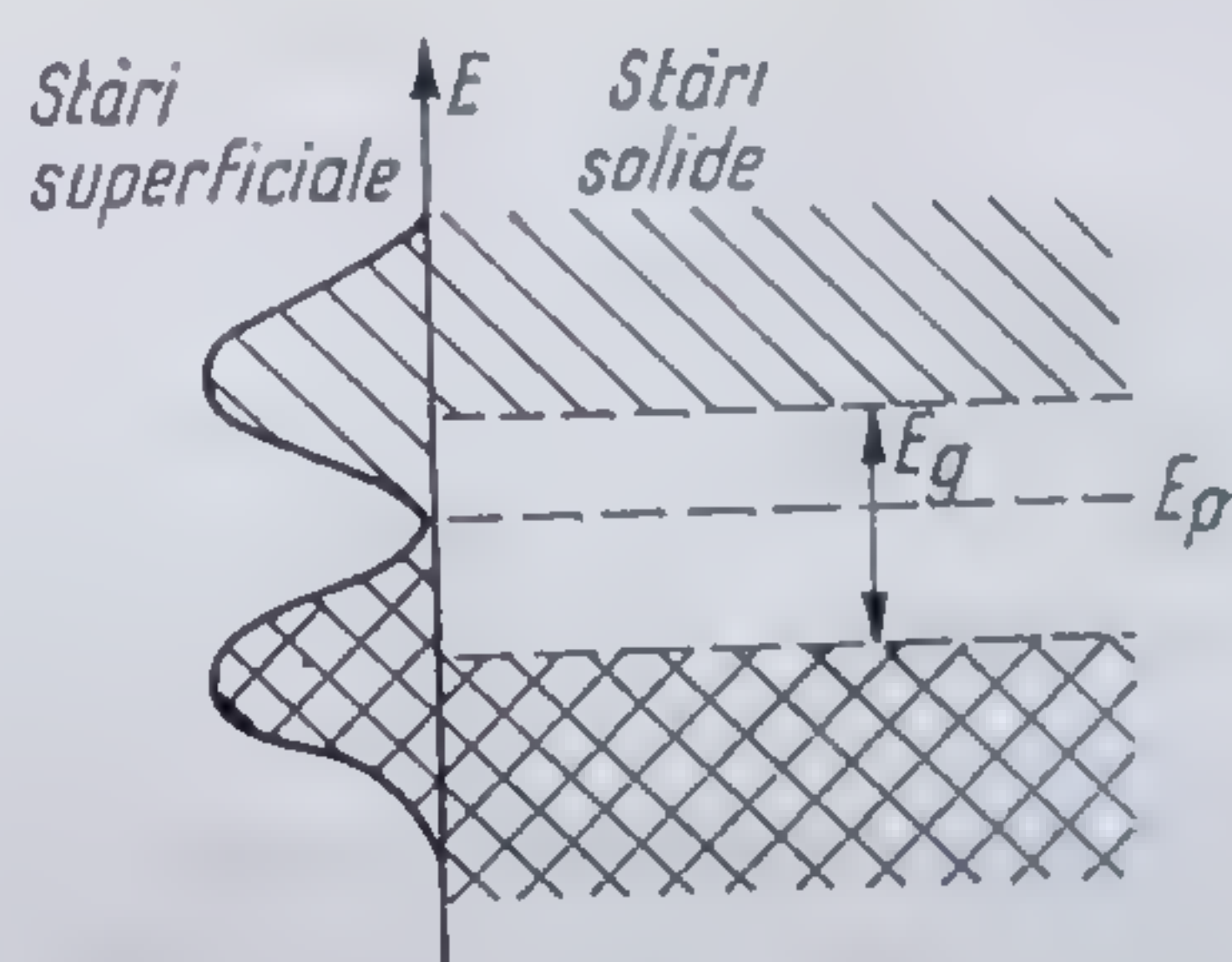


Fig. 11.9.4

complexe, dar trebuie remarcat că, de fapt, într-o primă aproximație, spre suprafața solidului se strică treptat numai periodicitatea pe direcția normală la respectiva suprafață, astfel încît componenta k_{\perp} a vectorului de undă își pierde sensul obișnuit, accentul căzînd pe găsirea spectrului $E_s = E_s(k_{||})$, unde $k_{||}$ este vectorul de undă paralel cu suprafața liberă a solidului. Au fost create metode aproximative de calcul [41], care încearcă să găsească acest spectru, plecînd de la faptul că aspectele lui caracteristice se pot obține printr-o „proiectare” a structurii zonale pe o direcție ce corespunde, în spațiul (k), normalei la suprafața liberă a cristalului.

O astfel de operație de „proiectare” se obține fie printr-o creștere a dimensiunii celulelor elementare pe respectiva direcție, fie prin metoda subrețelilor paralele cu suprafața cristalului, dar cu parametrii diferiți. De regulă, se obțin funcții de undă $\psi(x)$ cu variație exponențială, care se atenuează pe direcția normală la suprafața cristalelor (fig. 11.9.3), de ambele părți ale acesteia. În consecință, aceste funcții vor descrie stări superficiale mai mult sau mai puțin legate, ceea ce atrage după sine o îngustare a benzilor energetice permise spre suprafața solidului (fig. 11.9.4), existând chiar posibilitatea despicării acestora în benzi foarte înguste, apropiate de stările energetice atomice. Fără a intra în detalii de calcul, este de reținut doar că după anul 1960 au fost imaginate și realizate o serie de metode experimentale, cu ajutorul cărora rezultatele acestor calcule pot fi verificate, respectiv se obține expresia $E_s(k_{||})$ pentru suprafețe solide foarte curate. Din rândul acestor metode fac parte: difracția electronilor foarte lenți pe suprafețe cristaline, spectroscopia electronilor emiși de suprafețele solide în câmp electrostatic (spectroscopia Auger [79]), spectroscopia neutralizării ionice, fotoemisia electronică cu rezoluție unghiulară în ultraviolet [84]

Aflarea spectrelor energetice superficiale presupune însă rezolvarea ecuației lui Schrödinger (11.3.4) în care termenul $V(r)$ se va compune dintr-un termen superficial $V_s(x)$, ales în așa fel încît să exprime caracteristicile experimentale ale barierei de potențial superficiale (vezi fig. 11.9.3) și dintr-un termen $V_d(x)$, periodic în planul xy . Condițiile la limită ciclice de tip Born-Kármán (11.3.12) trebuie de asemenea înlocuite, pe suprafața solidului, cu condiții periodice. Vor interveni desigur calcule destul de

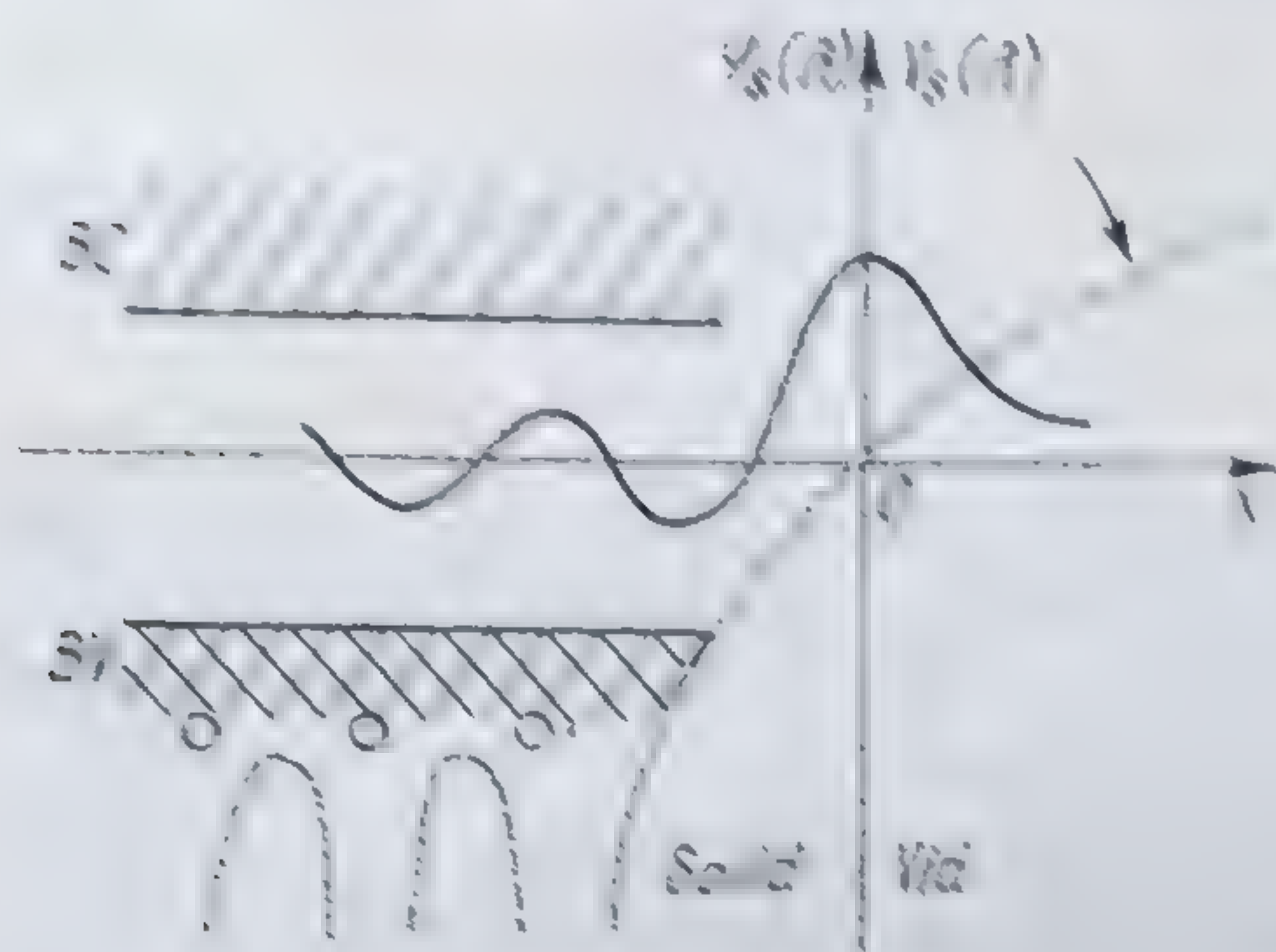


Fig. 11.9.3

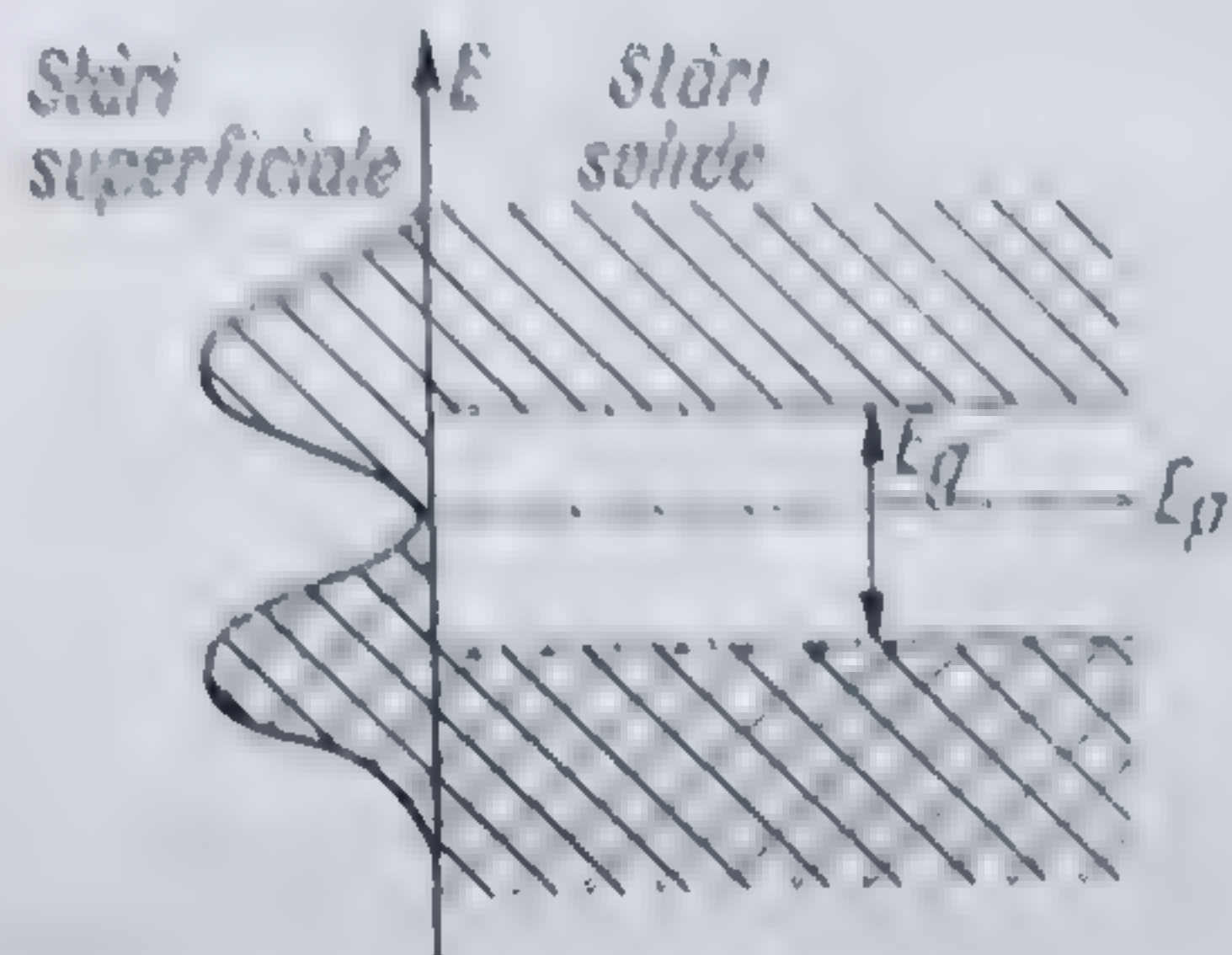


Fig. 11.9.4

complexe, dar trebuie remarcat că, de fapt, într-o primă aproximație, spre suprafața solidului se strică treptat numai periodicitatea pe direcția normală la respectiva suprafață, astfel încît componenta k_{\perp} a vectorului de undă își pierde sensul obișnuit, accentul căzînd pe găsirea spectrului $E_s = E_s(k_{\parallel})$, unde k_{\parallel} este vectorul de undă paralel cu suprafața liberă a solidului. Au fost create metode aproximative de calcul [41], care încearcă să găsească acest spectru, plecînd de la faptul că aspectele lui caracteristice se pot obține printr-o „proiecție” a structurii zonale pe o direcție ce corespunde, în spațiul (k) , normalei la suprafața liberă a cristalului.

O astfel de operație de „proiecție” se obține fie printr-o creștere a dimensiunii celulelor elementare pe respectiva direcție, fie prin metoda subrețelelor paralele cu suprafața cristalului, dar cu parametrii diferiți. De regulă, se obțin funcții de undă $\psi(x)$ cu variație exponențială, care se atenuează pe direcția normală la suprafața cristalelor (fig. 11.9.3), de ambele părți ale acesteia. În consecință, aceste funcții vor descrie stări superficiale mai mult sau mai puțin legate, ceea ce atrage după sine o îngustare a benzilor energetice permise spre suprafața solidului (fig. 11.9.4), existînd chiar posibilitatea despicării acestora în benzi foarte înguste, apropiate de stările energetice atomice. Fără a intra în detalii de calcul, este de reținut doar că după anul 1960 au fost imaginare și realizate o serie de metode experimentale, cu ajutorul cărora rezultatele acestor calcule pot fi verificate, respectiv se obține expresia $E_s(k_{\parallel})$ pentru suprafețe solide foarte curate. Din rîndul acestor metode fac parte: difracția electronilor foarte lenți pe suprafețe cristaline, spectroscopia electronilor emiși de suprafețele solide în cîmp electrostatic (spectroscopia Auger [79]), spectroscopia neutralizării ionice, fotoemisia electronică cu rezoluție unghiulară în ultraviolet [84]

etc. Toate aceste metode sînt condiționate însă de calitatea suprafețelor. Există și procedee pentru a realiza suprafețe foarte curate, calitate care în vid de peste 10^{-8} Pa se menține cel puțin 10 s, interval suficient de lung pentru a putea analiza, de exemplu, spectrul electronilor emiși sub un anumit unghi față de normală, din care se obține $E_s(k_{||})$.

De bariera superficială de potențial este legat și coeficientul de tensiune superficială σ . Calculule efectuate de Bardeen [41] conduc la concluzia că

$$\sigma = \sigma_0 - TS'_\sigma \quad (11.9.9)$$

unde

$$\sigma_0 = \frac{1}{4\pi} \int_0^{E_F} [E_F - E(k)] k dk \quad (11.9.10)$$

S'_σ fiind entropia superficială, determinată de vibrațiile superficiale ale rețelei. Desigur, stările superficiale vor condiționa și fenomenele de adsorbție și desorbție. Adsorbția constă în reținerea atomilor, moleculelor sau ionilor la suprafața unui solid. Adsorbția este considerată proces fizic atît timp cît orbitalii atomului adsorbit nu se suprapun peste orbitalii structurii cristaline, dar ele se transformă în proces chimic sau chemisorbție, dacă intervin o astfel de suprapunere, atomul chimisorbit schimbînd electroni cu ionii bazei structurii cristaline. Primul proces se desfășoară cu o energie de activare practic neglijabilă ($E_a \simeq 0,1$ eV). Atomul adsorbit este reținut la suprafața solidului de forțele create de către fluctuațiile câmpului electric cristalin. De aceea, cu cît simetria acestui câmp este, la suprafața cristalului, mai redusă, cu atît este mai mare și capacitatea sa de atracție, atomul putînd fi considerat adsorbit de la distanța de $1 \div 2$ diametre atomice față de suprafața solidului.

Chemisorbția se realizează cu o energie de activare, $E_a \simeq 1$ eV și este un proces de adsorbție ionică. Tot cu energie de activare se desfășoară și procesele de difuzie superficială, din care cauză coeficientul superficial de difuzie D_s va depinde de temperatură, conform relației

$$D_s(T) = D(0) e^{-\frac{E_a}{k_b T}} \quad (11.9.11)$$

Desigur, și alte proprietăți fizice sînt afectate de prezența suprafeței. Este știut, de exemplu, că ordonarea feromagnetică nu este posibilă într-o structură bidimensională [135] și, de aceea, odată cu micșorarea cifrei de coordinație a ionilor feromagnetici va scădea în general și magnetizarea spontană a respectivului strat. Aceste concluzii sînt atestate de experiență [135].

Prezența la suprafața unui corp feromagnetic a unor straturi cu magnetizări din ce în ce mai scăzute este, din punct de vedere matematic și fizic, echivalentă cu existența unei anizotropii magnetice superficiale, a cărei densitate de energie poate fi exprimată prin relația

$$E_s = k_s \cos^2 \theta \quad (11.9.12)$$

θ fiind unghiul dintre vectorul de magnetizare spontană \mathbf{M} și normala la suprafața respectivă. Și mărimea k_s din expresia (11.9.12) poate fi deter-

minată experimental. S-a obținut că ea depinde într-adevăr de structura cristalină a suprafeței solidului, dar și de tratamentul la care această suprafață este supusă (oxidări, straturi de acoperire etc.), putând avea valori cuprinse între 10^{-4} și 10^{-3} J/m².

Alterările de simetrie și compoziție la nivelul suprafețelor pot determina, prin intermediul unor interacțiuni cu rază scurtă de acțiune, și forțe care produc o „fixare” superficială a direcției spinilor superficiali, caz în care magnetizarea spontană a planelor cristaline superficiale este superioară celei a planelor interioare. Această fixare este principala cauză a generării, în condiții de rezonanță magnetică, a *undelor staționare de spin*, respectiv a *undelor de spin superficiale*, care pot fi puse în evidență în condiții de rezonanță.

§ 11.10. ELEMENTE DE FIZICA PELICULELOR SUBȚIRI

Un ansamblu format din două suprafețe (de regulă, paralele între ele) care delimitează un solid cu grosimea d suficient de mică ($d \simeq 10^2 - 10^3$ Å), astfel încât proprietățile sale volumice să fie neglijabile în raport cu cele de suprafață, formează o peliculă sau un strat* subțire. Întrucât o peliculă subțire se obține prin condensarea substanței respective pe un suport solid (fig. 11.10.1), cele două suprafețe ale ei (dinspre suportul solid, respectiv dinspre mediul gazos sau lichid în care se găsește pelicula), vor avea, în general, proprietăți fizice distincte.

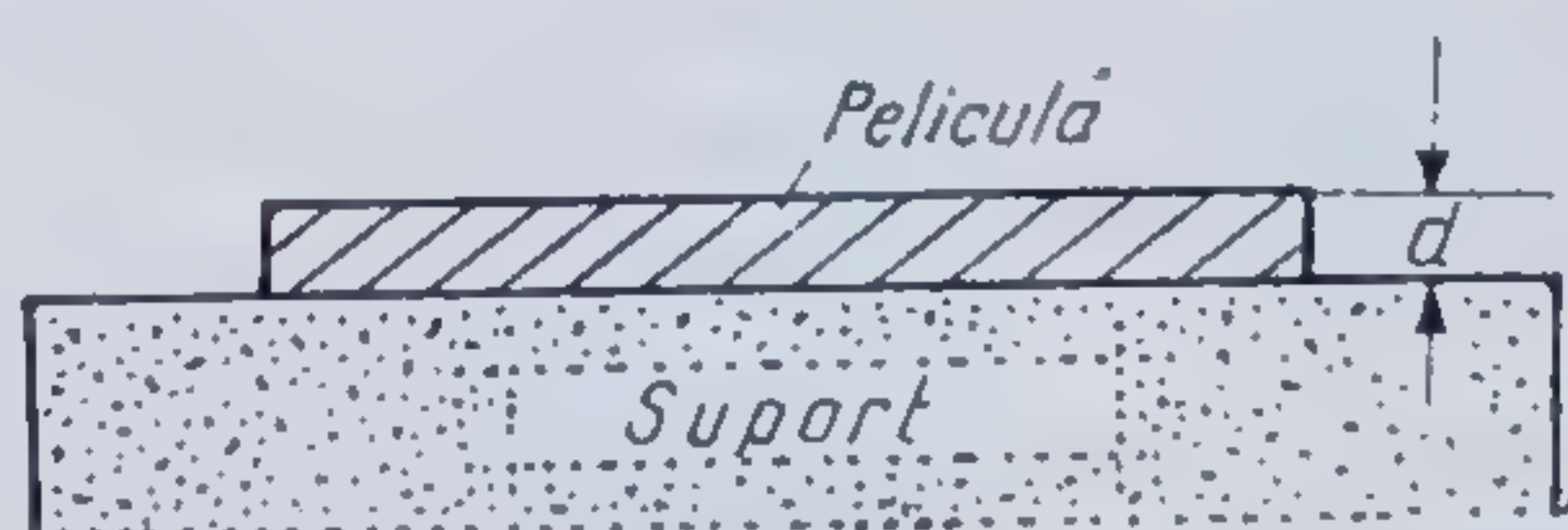


Fig. 11.10.1

Multiplele aplicații din tehnica electronică, a mașinilor electronice de calcul, în detecția radiației termice și în general a radiațiilor electromagnetice și nucleare, aplicații care beneficiază de avantajul miniaturizării și al integrării, al folosirii unor scheme electronice performante, cu consumuri extrem de mici de energie, dar cu viteze mari de execuție, al sensibilităților ridicate au determinat o rapidă dezvoltare a fizicii peliculelor subțiri. Aceasta vizează atât realizarea unor tehnologii de obținere a peliculelor mono-și policristaline, din diverse substanțe și cu proprietăți prestabilite, cât și studiul, la nivel macroscopic și microscopic, al proprietăților și fenomenelor specifice acestor pelicule subțiri. Desigur că în limitele unui paragraf nu se poate face o prezentare în detaliu a tuturor acestor

* Pelicula subțire conține două straturi superficiale cu proprietăți distincte și din acest punct de vedere pare neadecvată denumirea de strat subțire, încetățenită deja în literatura noastră de specialitate.

probleme. Vom expune, totuși, succint, câteva aspecte referitoare la tehnologia preparării peliculelor subțiri, cât și la unele dintre proprietățile lor magnetice.

Există mai multe procedee de obținere a peliculelor subțiri, fiecare dintre ele prezentând avantaje și dezavataje, funcție de tipul și compoziția peliculei ce urmează a fi realizată și anume [111]:

a) evaporarea termică în vid și condensarea vaporilor pe suporturi solizi aflați la temperaturi T , adecvate;

b) pulverizarea catodică;

c) depunerea electrochimică din soluții de electroliți;

d) descompunerea pe suporturi solizi a unor compuși metaloorganici sau metaloanorganici;

e) restabilirea chimică a metalelor din soluții de săruri (pe cale termică);

f) restabilirea metalelor din săruri prin bombardament ionic;

g) epitaxia cu fascicule de ioni etc.

Evaporarea termică se realizează la presiuni scăzute ($p = 10^{-4} \div 10^{-6}$ torr), prin încălzirea substanțelor ce urmează a fi depuse sub formă de peliculă subțire, pînă la temperatura de evaporare. Se folosesc, în acest scop, diverse sisteme de evaporatoare realizate din sîrmă de wolfram, molibden, tantal sau niobiu (fig. 11.10.2), topirea și evaporarea prin curenți

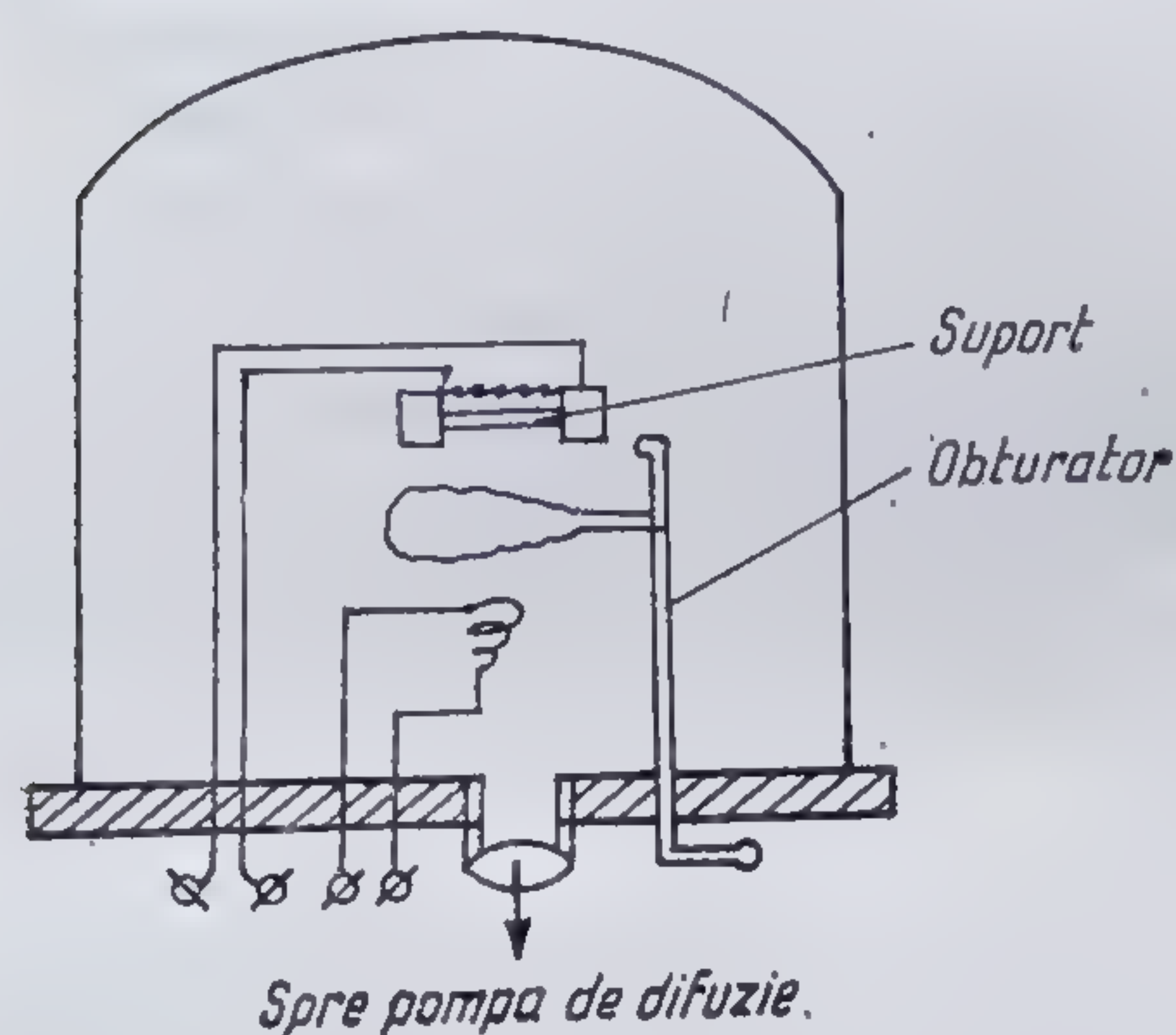


Fig. 11.10.2

de inducție în evaporatoare de alumina, topirea și evaporarea prin bombardament electronic sau ionic etc. Materialul evaporat formează, în condiții adecvate de presiune, un fascicul molecular care-întîlnind suportul la o temperatură corespunzătoare-se va condensa formînd pe acesta pelicula subțire. De viteza de evaporare, calitățile vidului, natura și temperatura suportului depind calitățile peliculei.

Pulverizarea catodică se realizează printr-o descărcare electrică într-un mediu de gaze inerte (He, Ne, Ar, Kr, N₂ etc.), aflate la presiuni de $10^{-1} \div 10^{-3}$ torr, între doi electrozi, catodul

fiind constituit din materialul ce urmează a fi depus, sub formă de peliculă subțire, pe un suport solid care joacă rol de anod. În acest proces ionii pozitivi ai gazului inert bombardează suprafața catodului (a țintei) și smulg din acesta atomi, care se vor depune pe anod și vor forma respectiva peliculă subțire. Desigur că mecanismele pulverizării și ale formării peliculei subțiri sînt complexe, dar metoda este utilă în obținerea unor pelicule subțiri din materiale greu fuzibile (oxizi, ferite, aliaje speciale etc.)

Începînd cu anul 1962 au fost puse la punct tehnici de pulverizare prin descărcări electrice de radiofrecvență, ținta fiind bombardată atît

de ioni pozitivi ai gazului inert, cât și de electroni, aceștia din urmă avînd rolul de a neutraliza ioni de gaz inert de pe suprafața țintei. Se micșorează astfel impurificarea suprafeței țintei cu particule puternic active și sporește viteza de depunere.

Depunerea electrochimică se face într-o baie de electroliză, în care catodul este realizat dintr-un suport pe care urmează a se forma pelicula subțire, iar anodul din materialul (metalul) din care urmează a se forma pelicula. Caracteristicile și compoziția electrolitului, densitatea curenților electrici de electrod și temperatura vor determina calitățile peliculei depuse.

O tehnică relativ recentă de obținere a peliculelor subțiri este tehnica restabilirii metalelor din săruri sub acțiunea bombardamentului ionic. Această metodă s-a dezvoltat în strînsă legătură cu tehnologia microprocesoarelor și a circuitelor integrate. Suportul se acoperă cu un strat subțire din soluția cu compusul metalic respectiv (putînd fi de exemplu pulverizat cu soluție de Pd Cl_2), iar apoi se bombardează puternic cu un fascicul de ioni, de 50—100 keV. Sub acțiunea acestui bombardament sarea se descompune, iar pe suport se formează o peliculă subțire de paladiu metalic. De notat că dacă suportul este „catalizat” în prealabil cu soluție de SnCl_2 (sau $\text{SnCl}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$), atunci pe un astfel de suport se pot „copia”, la scară mică, scheme electronice oricît de complicate, prin proiectarea lor pe suporti cu ajutorul radiațiilor ultraviolete, deoarece s-a constatat că depunerea unor metale (Ni, Co, etc.) este inhibată de o preiluminare în ultraviolet (UV) (se va obține deci un negativ al schemei proiectate), iar a altora (cum este cuprul) este favorizată de o astfel de preiluminare în UV (obținîndu-se un clișeu pozitiv al schemei). În felul acesta, pe suprafața redusă a unui monocristal de siliciu se pot copia circuitele electronice complexe în care din pelicule subțiri se realizează diversele elemente și dispozitive de circuit, cum sînt: conductoarele, rezistoarele, condensatoare, componente semiconductoare active (diode și tranzistori) etc. Funcționalitatea unor astfel de circuite va depinde de proprietățile fizice ale peliculelor subțiri care compun respectivul circuit. Exemplificăm acest lucru pe cazul elementelor de memorie cu pelicule subțiri de permalloy (aliaj 80% nichel — 20% fier).

Se știe că datorită cîmpului de demagnetizare H_d puternic, existent la suprafața unei pelicule magnetice subțiri (factorii de demagnetizare $N_x = N_y = 0$ în planul peliculei, iar $N_z = 1$ și conform relației (6.8.122) avem $H_d = M$), vectorul magnetizare \mathbf{M} se orientează, în condiții de echilibru și în lipsa acțiunilor exterioare, paralel cu suprafața peliculei și pe o anumită direcție, numită de *ușoară magnetizare* (fig. 11.10.3). Perpendicular pe această axă de ușoară magnetizare va interveni o *axă de grea magnetizare*.

Vectorul \mathbf{M} poate fi rotit pe direcția axei de grea magnetizare, dacă se aplică un cîmp magnetic $\mathbf{H} \geq \mathbf{H}_k$, unde \mathbf{H}_k este cîmpul anizotropiei uniaxiale a peliculei. Dar o astfel de rotație va putea produce, prin inducție, un semnal electric într-un alt conductor, așezat în apropierea peliculei. Prin urmare, prin intermediul peliculei de permalloy, un semnal electric

poate fi trecut sau nu de pe o linie pe alta, pelicula jucînd rol de element bistabil. Or, pe funcționarea unui asemenea element bistabil se bazează funcționarea unor mașini electronice de calcul, realizate pînă nu demult

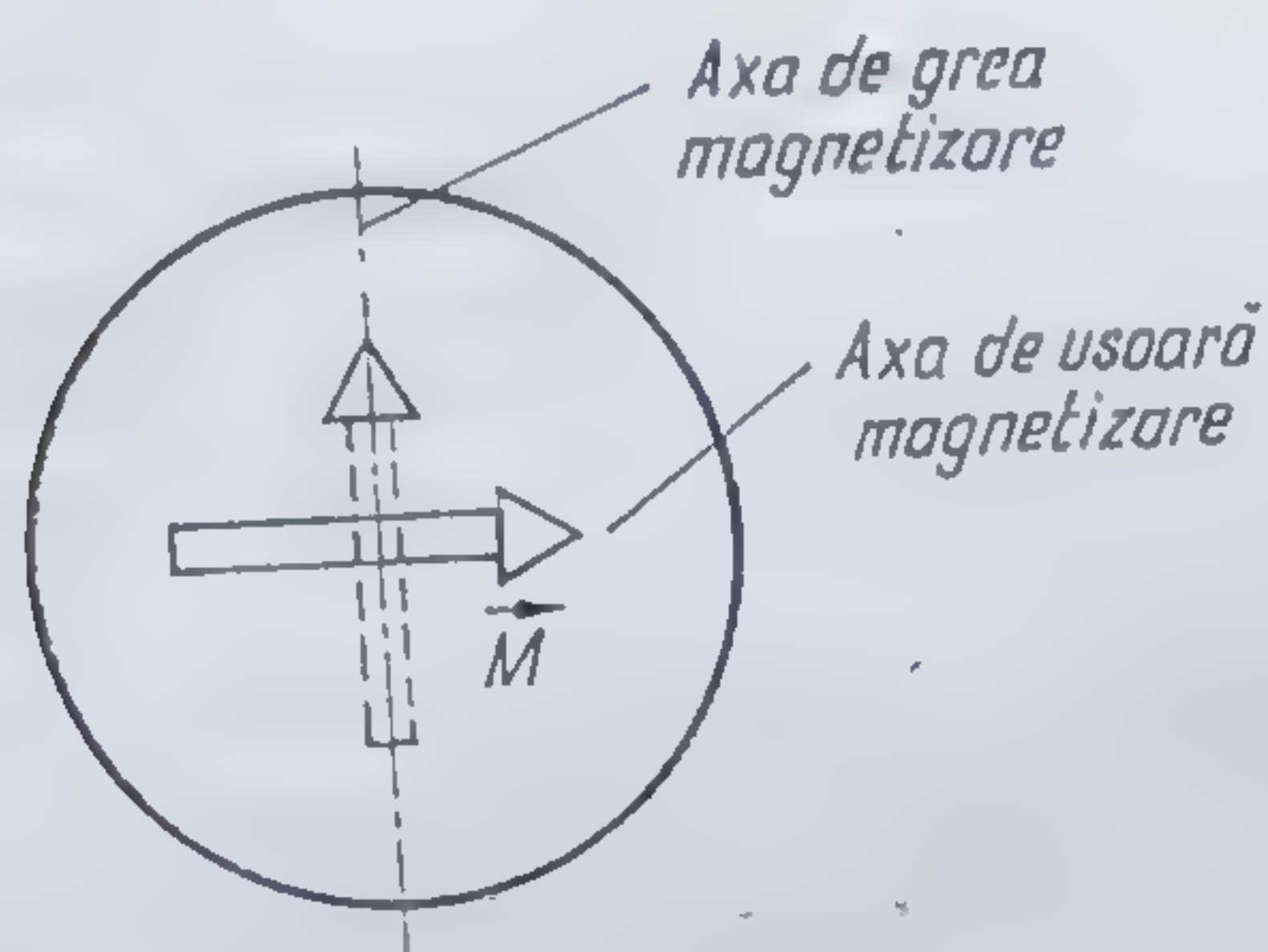


Fig. 11.10.3

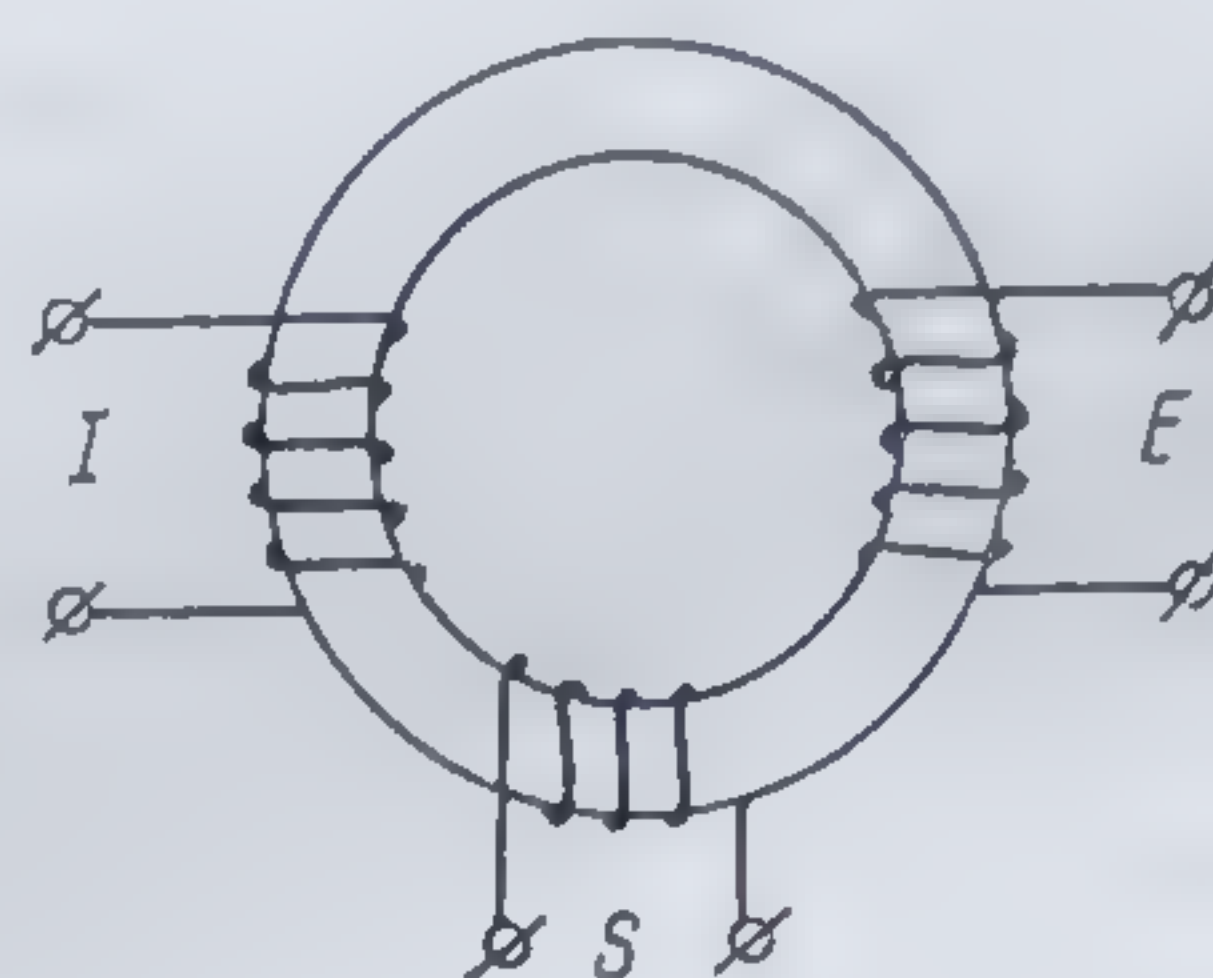


Fig. 11.10.4

cu toroizi de ferită, care posedă bobine de intrare (I), de ieșire (E) și de stocare (S) (fig. 11.10.4), pentru realizarea elementelor bistabile.

De remarcă că, prin utilizarea peliculelor subțiri, se reduce în mod apreciabil gabaritul mașinii, obținîndu-se în același timp o creștere sim-

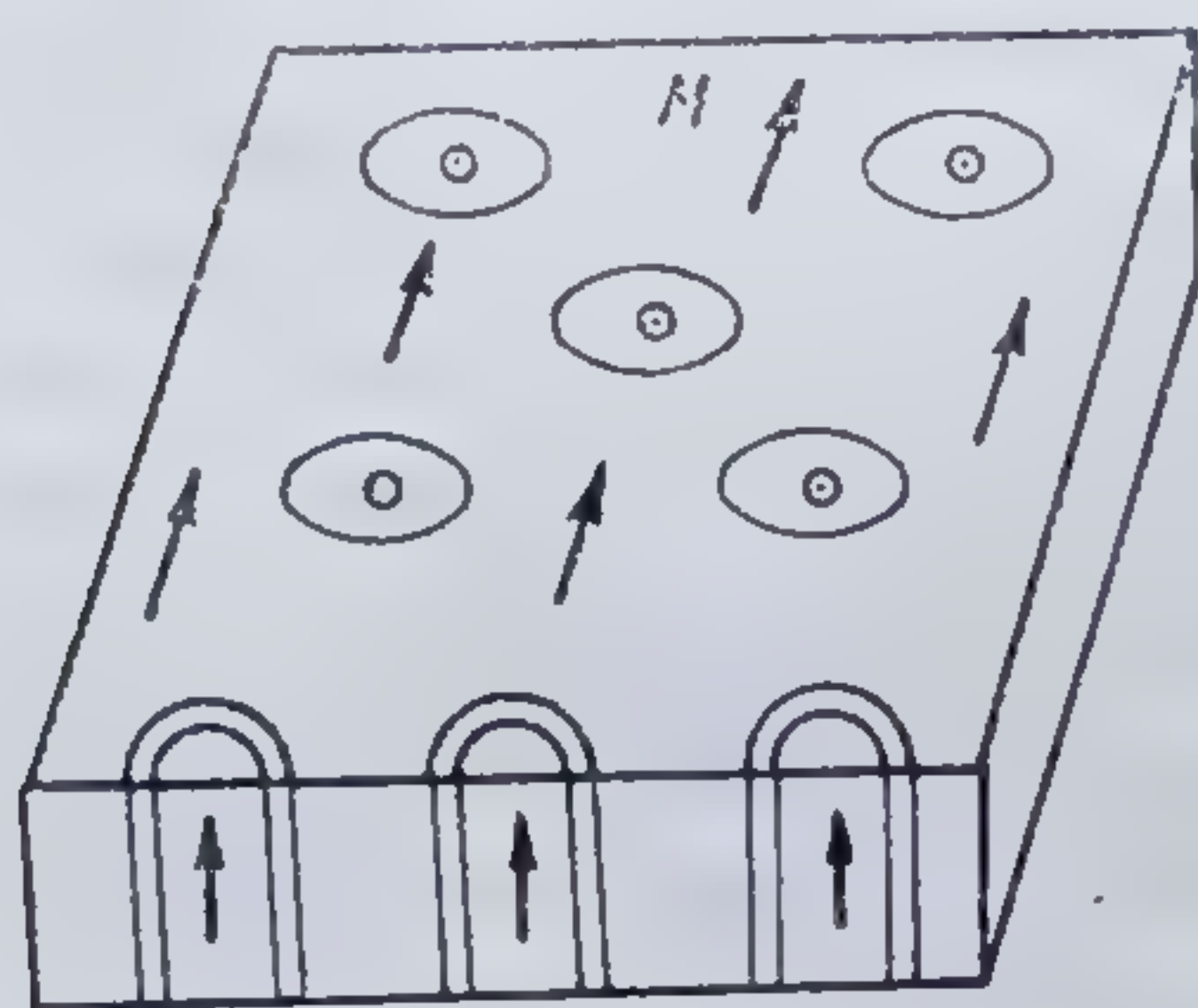


Fig. 11.10.5

țitoare (cu $2 \div 3$ ordine de mărime) a vitezei de calcul. În ultima vreme au început să fie intens studiate peliculele subțiri în care se formează așa-numitele *domenii de magnetizare cilindrice* (fig. 11.10.5). Ele apar într-o peliculă, magnetizată în planul ei, sub forma unor domenii cilindrice cu diametrul bazei de aproximativ $1 \mu\text{m}$, în care magnetizarea este orientată perpendicular pe planul peliculei. Cele mai favorabile caracteristici, din acest punct de vedere, le oferă peliculele subțiri monocristaline de YIG (granat de ytriu și fier cu struc-

tură simplă, cubică), care reprezintă pentru fizica solidului, după Ch. Kittell, ceea ce a reprezentat insecta drossofila pentru genetică, pe această structură fiind probate majoritatea teoriilor asupra corpului solid.

Monodomeniile cilindrice sînt de asemenea elemente bistabile, avînd axa ușoară de magnetizare perpendiculară la suprafața peliculei, și deci principal ar putea fi folosite ca elemente de memorie într-o mașină electronică de calcul. O astfel de memorie ar putea înmagazina în jur de $10^3 - 10^9$ biți/cm², cu consum redus de energie de numai 10^{-13} J/bit și cu viteze de $10^{11} \div 10^{12}$ operații pe secundă. Există încercări de a înregistra holografic informație pe o astfel de peliculă [87], folosindu-se puterea lor rotatorie Faraday extrem de mare (unghiul de rotire a planului de polarizare al luminii într-o peliculă de YIG, cu adăus de bismut, atinge valoarea gigant de $5 \cdot 10^4$ grade/cm, intervenind și efecte cromatice).

Elemente de fizica nucleului și a particulelor elementare

§ 12.1. INTRODUCERE

Noțiunea de nucleu atomic a fost introdusă în anul 1911 de către Rutherford, care, pe baza experiențelor de difuzie a particulelor α efectuate între anii 1906—1911, a formulat *modelul planetar al atomului*. Potrivit acestui model, nucleul ocupă partea centrală a atomului, având dimensiuni cuprinse între 10^{-15} m și $5 \cdot 10^{-15}$ m, deci cu aproximativ cinci ordine de mărime mai reduse decât dimensiunile atomilor ($r_{\text{atom}} \simeq 10^{-10}$ m). Nucleul atomic este încărcat cu sarcină electrică pozitivă și conține aproape întreaga masă a atomului (la atomul de uraniu, de exemplu, $m(^{238}_{92}\text{U})/m_e \simeq 7,4 \cdot 10^6$ în timp ce la sistemul planetar, așa cum s-a menționat în §1.8, $M_{\text{Soare}}/M_{\text{planete}} = 7 \cdot 10^2$).

Studiile de difuzie a particulelor α sub unghiuri de împrăștiere mari, continuate de către J. Chadwich, H. Geiger și E. Mardsen, precum și studiul spectrelor caracteristice ale radiațiilor X, întreprinse de H. G. Moseley, au arătat că numărul sarcinilor electrice elementare pozitive din nucleu este egal cu numărul de ordine Z din sistemul periodic al respectivului element. Cel mai ușor nucleu, care conține o singură astfel de sarcină elementară, este nucleul de hidrogen și el a primit numele de *proton* (p).

Măsurătorile de masă atomică m , efectuate îndeosebi după anul 1921, când Aston realizează primul *spectrograf de masă*, au condus la definirea unui alt număr caracteristic nucleelor atomice și anume a *numărului de masă* A , care reprezintă numărul întreg cel mai apropiat de masa atomică a respectivului element, exprimată în unități atomice de masă (o unitate atomică de masă fiind egală cu a 12-a parte din masa izotopului $^{12}_6\text{C}$, adică $1 \text{ u} = 1,66 \cdot 10^{-27}$ kg). Cele două numere Z și A reprezintă două dintre caracteristicile esențiale ale nucleelor atomice. Lor li s-au adăugat mai târziu *energia de legătură* W_{leg} , *spinul nuclear* I , *momentul de cuadrupol electric* Q , *izospinul* T , *paritatea* P și alte caracteristici statistice sau dinamice. O serie dintre proprietățile nucleelor atomice au fost obținute pe cale experimentală încă înainte de a se ști de existența lui. Aceasta s-a datorat descoperirii, în anul 1896, a radioactivității naturale de către H. Becquerel. Cu un an mai târziu, Rutherford a demonstrat că în fenomenul

de radioactivitate apar două feluri de radiații și anume *radiațiile α* , formate din nuclee de heliu și *radiațiile β^-* , formate din electroni. În anul 1900, P. Willard descoperă *radiația γ* , care s-a dovedit a fi de natură electromagnetică. Marie și Pierre Curie reușesc să separe câteva elemente puternic radioactive, cum este radiul ($^{226}_{80}\text{Ra}$), iar împreună cu A. Laborde stabilesc experimental că temperatura acestor substanțe este mai ridicată decât a mediului înconjurător, rezultat care evidențiază că fenomenele de radioactivitate sînt însoțite de degajare de energie. În același timp, Rutherford și Soddy ajung la concluzia că prin radioactivitate se produce „o transmutație a elementelor”, idee confirmată în mod strălucit, în anul 1919, cînd Rutherford reușește să producă prima *reacție nucleară*: prin bombardarea cu particule α a nucleelor de azot, el obține protoni de mare energie și atomi de oxigen.

Între timp au fost realizate câteva metode experimentale adecvate de studiu al produselor din reacțiile nucleare, de o mare atenție bucurîndu-se *camera cu ceață* a lui Wilson și *emulsiile nucleare*, întrucît acestea permiteau vizualizarea și înregistrarea individuală a microparticulelor încărcate electric care intră, respectiv care ies dintr-o reacție nucleară. Prin introducerea camerei Wilson într-un cîmp magnetic s-au putut determina și o serie dintre parametrii dinamici ai respectivelor microparticule.

S-au efectuat astfel studii experimentale riguroase asupra reacțiilor nucleare, studii din care s-au obținut informații prețioase cu privire la structura și stabilitatea nucleului atomic. Semnificativă, din acest punct de vedere, s-a dovedit a fi reacția produsă prin bombardarea beriliului cu particule α , reacție obținută de către W. Bothe și H. Becker în anul 1930, deoarece radiația foarte penetrantă care rezultă dintr-o astfel de reacție a fost identificată, în anul 1932, de către J. Chadwick, ca fiind formată din *neutroni* — particule neutre din punct de vedere electric, cu masă proprie m_n apropiată de masa proprie m_p a protonului. Pe baza acestei descoperiri se formulează, în același an, concepția cu privire la *structura protono-neutronică* a nucleelor (concepție propusă independent de D. Ivanenco și de W. Heisenberg), potrivit căreia un nucleu atomic este constituit din Z protoni și $A-Z$ neutroni.

Tot pe cale experimentală s-a stabilit că majoritatea nucleelor atomice prezintă o stabilitate foarte mare, respectiv că ele sînt caracterizate prin *energii de legătură W_{leg}* , de 10^6 ori mai mari decât energiile de legătură ale atomilor și moleculelor. Se ajunge astfel la concluzia că între protonii și neutronii din nucleu, particule denumite *nucleoni*, intervin puternice forțe de interacție care au primit numele de *forțe nucleare*. Multe dintre proprietățile acestor forțe au fost stabilite tot pe baza informațiilor experimentale, unele legate de variația energiei de legătură a nucleului în funcție de numărul nucleonilor din nucleu, iar altele, de interacțiile nucleonilor cu nucleul sau cu alte microparticule din clasa așa-numitelor *particule elementare* (vezi § 12.10). Dintre aceste proprietăți, formulate pentru prima dată de P. Wigner, se remarcă în mod deosebit următoarele:

- independența forțelor nucleare de sarcina electrică a nucleonilor;
- raza lor scurtă de acțiune ($R_0 = (1,45 \div 1,5) \text{ fm}$, unde un fermi $1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$);

— intensitatea lor mare (de 10^4 ori mai mare decât a forțelor electromagnetice);

— caracterul de saturație al acestor forțe (un nucleon interacționează numai cu primii săi vecini);

— caracterul lor tensorial și necentral (forța de interacție dintre doi nucleoni nu se dezvoltă pe direcția ce unește cei doi nucleoni, ci pe o altă direcție care depinde de orientarea reciprocă a spinilor nucleari ai respectivilor nucleoni);

— forțele nucleare sînt de atracție pe distanțe de $1,4 \div 1,5$ fm și de respingere pe distanțe mai mici de 1 fm.

Pe baza acestor proprietăți și a unei sugestii care aparține lui E. Tamm, în anul 1935 Hideki Yukawa reușește să elaboreze *teoria mezonică a forțelor nucleare*. În această teorie, forțele nucleare sînt privite ca *forțe de schimb* ce se realizează între nucleonii din nucleu printr-un schimb virtual de *mezoni* π , particule cu masă proprie mijlocie, cuprinsă între masa proprie a nucleonului și masa proprie a electronului. Au fost introduși trei astfel de mezoni, doi încărcăți electric, $\pi^\pm (m_{\pi^\pm} = 274 m_e)$ și unul neutru $\pi^0 (m_{\pi^0} = 264 m_e)$.

Descoperirea mezonilor π în *radiația cosmică*, împreună cu o gamă largă de alte particule, zise elementare, cu mase proprii fie mai mici decât a nucleonului (cum sînt *mezonii* μ și ceilalți *leptoni*), fie mai mari (cum sînt *barionii*) a constituit o strălucită verificare a teoriei mezonice, dar a demonstrat în același timp că domeniul ei de valabilitate este destul de restrîns. Astăzi, cu ajutorul puternicelor acceleratoare de microparticule de care dispunem se pot genera fascicule intense de leptoni, mezoni, nucleoni sau barioni pe cale artificială, iar studiul reacțiilor produse de astfel de microparticule a scos în evidență caracterul deosebit de complex al interacțiilor care intervin la nivel nuclear și subnuclear. Trebuie notat că datorită acestui caracter complex, încă nu dispunem de o teorie desăvîrșită a forțelor nucleare *. Tot din aceleași motive, teoriile cuantice nu au putut fi extinse la studiul mișcării nucleonilor din nucleu cu același succes ca cel întîlnit în cazul fizicii atomice sau în cel al solidului (unde principalele interacții erau cele de natură electromagnetică). Intervin dificultăți legate mai ales de complexitatea pe care o capătă ecuațiile lui Schrödinger. În cazul nucleelor formate din mai mulți nucleoni, ca urmare a caracterului necentral al forțelor nucleare, aproximațiile de tip Hartree sau Hartree-Fock (vezi §§ 10.7 și 11.2) nu-și mai păstrează valabilitatea.

Dar complexitatea nucleului atomic și a problematicii sale trebuie privită și prin prisma interesantelor lui proprietăți fizice, unele de importanță principială deosebită, cum sînt cele legate de stabilitatea, compoziția și structura nucleului sau mecanismele de reacție, iar altele de mare interes practic (obținerea și utilizarea reacțiilor nucleare, a izotopilor radioactivi și stabili sau a energiei nucleare). Iată de ce s-au făcut și se fac investiții mari și se depun eforturi susținute în toate domeniile fizicii nucleare și ale

* Cromodinamica cuantică (QCD) este acceptată, în ultima vreme, ca o teorie satisfăcătoare a forțelor nucleare, hadronice (vezi §12.10).

particulelor elementare și, cu toate că nu dispunem de o teorie unitară a tuturor interacțiunilor care se produc la nivel nuclear și subnuclear, dispunem de o imensă cantitate de informații (teoretice și experimentale) despre nucleu și despre fenomenele nucleare, care au avut deja un impact deosebit asupra altor domenii, începînd cu tehnica și terminînd cu cosmologia [11, 71, 83, 110, 113, 127].

Prezentarea exhaustivă a acestor cunoștințe de fizică nucleară în cadrul unui singur capitol este desigur imposibilă. Ne vom limita la cele mai importante, de orientare în domeniu, pe care le vom prezenta inductiv, pornind de la bazele lor experimentale.

§ 12.2. CARACTERISTICILE NUCLEULUI ATOMIC

Structura protono-neutronică a nucleului conferă semnificații fizice deosebite numerelor de ordine Z și de masă A , primul reprezentînd *numărul de sarcini electrice elementare* pozitive din nucleu, respectiv numărul de protoni din nucleu, iar al doilea *numărul de sarcini barionice* *, respectiv numărul de nucleoni din nucleu. De consemnat că ambele aceste numere de sarcină *se conservă* în toate procesele la care participă nucleul și, de aceea, cu ajutorul lor se pot descrie calitativ și cantitativ procesele nucleare.

Funcție de valorile lui Z și A nucleele atomice se grupează pe clase, în care unele dintre proprietăți și caracteristici sînt asemănătoare. Astfel, s-a constatat că speciile atomice cu același număr de ordine Z , dar cu numere de masă A diferite ocupă aceeași căsuță din sistemul periodic al elementelor și au proprietăți chimice foarte apropiate între ele. Aceste specii atomice au primit denumirea de *izotopi*. Cele 107 elemente cunoscute pînă în prezent posedă 279 de *izotopi stabili* (izotopi cu timpi de viață mai mari decît viața Terrei, care se evaluează la valoarea de 10^9 ani), și 1236 de *izotopi nestabili* (cu viață medie cuprinsă între $2 \cdot 10^{-3}$ și 10^9 ani). Distribuția izotopilor stabili este reprezentată în graficul din figura 12.2.1. De reținut că elementele $_{43}\text{Te}$, $_{84}\text{Po}$, $_{85}\text{At}$, $_{86}\text{Ru}$, $_{87}\text{Fr}$, $_{88}\text{Ra}$, $_{89}\text{Ac}$, $_{91}\text{Pa}$, $_{93}\text{Np}$, $_{94}\text{Pu}$, $_{95}\text{Am}$, $_{96}\text{Cm}$, $_{97}\text{Bk}$, $_{98}\text{Cf}$, $_{99}\text{Es}$, $_{100}\text{Fm}$, $_{101}\text{Md}$, $_{102}\text{Nb}$, $_{103}\text{Lw}$, $_{104}\text{Ku}$, $_{105}\text{X}$, $_{106}\text{X}$ și $_{107}\text{X}$ au fost obținute pe cale artificială și că deci ele posedă numai izotopi nestabili.

Pleiada izotopilor care constituie un element chimic poate fi formată din trei pînă la treizeci de izotopi (de exemplu, hidrogenul are doi izotopi stabili ^1_1H și ^2_1D și unul nestabil ^3_1T , iar $^{198}_{78}\text{Pt}$ are 30 de izotopi, dintre care 6 sînt stabili și 24 nestabili).

* Noțiunea de sarcină barionică s-a format prin analogie cu cea de sarcină electrică, pe baza constatării că numărul de nucleoni se conservă în procesele nucleare.

Speciile nucleare cu același număr de nucleoni A , dar cu numere de sarcină Z diferite posedă proprietăți fizice asemănătoare și au primit numele de *izobari*. De menționat că izobarii stabili se găsesc întotdeauna în perechi sau triade, de forma : ${}^{40}_{18}\text{Ar} - {}^{40}_{20}\text{Ni}$; ${}^{58}_{26}\text{Fe} - {}^{58}_{28}\text{Ni}$; ${}^{113}_{49}\text{Cd} - {}^{113}_{48}\text{Cd}$; ${}^{90}_{40}\text{Zr} - {}^{90}_{42}\text{Mo} - {}^{90}_{44}\text{Ru}$;

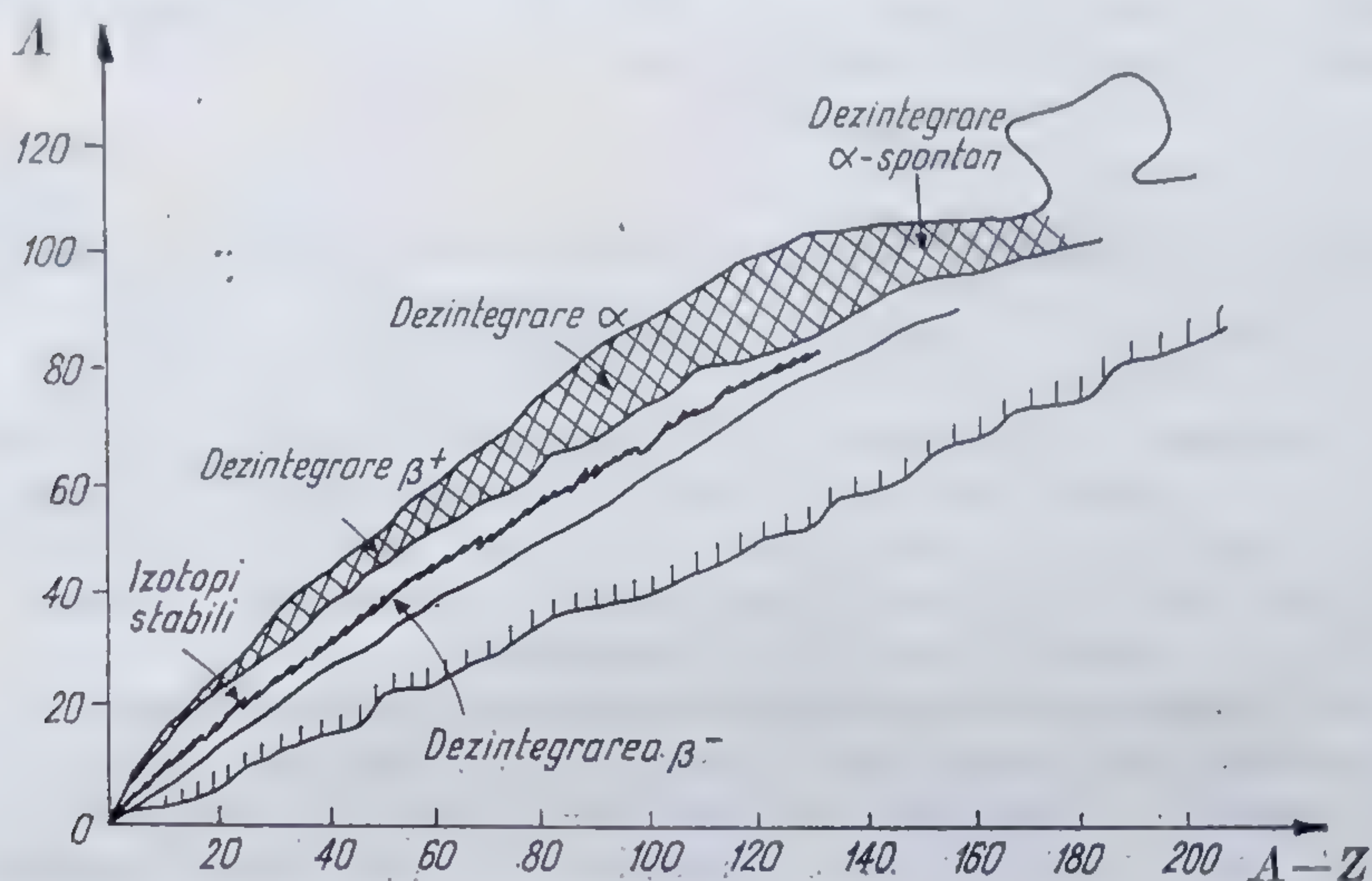


Fig. 12.2.1

${}^{124}_{50}\text{Sn} - {}^{124}_{52}\text{Te} - {}^{124}_{54}\text{Xe}$, în care Z variază de regulă cu două unități și mai rar cu o singură unitate.

Nuclizii cu același număr de neutroni $N = A - Z$, dar cu A și Z de valori diferite se numesc *izotoni* : (${}^{80}_{34}\text{Se}^{40} - {}^{81}_{35}\text{Br}^{40} - {}^{82}_{36}\text{Kr}^{40}$ sau ${}^{131}_{56}\text{Ba}^{82} - {}^{139}_{57}\text{La}^{82} - {}^{160}_{58}\text{Ce}^{82} - {}^{161}_{59}\text{Pr}^{82} - {}^{162}_{60}\text{Nd}^{82}$), iar cei cu același exces de neutroni $A - 2Z$ se numesc *izodioferi* (${}^{100}_{68}\text{Er}^{30} - {}^{170}_{70}\text{Y}^{30} - {}^{174}_{72}\text{Hf}^{30}$). În anul 1921, O. Hahn descoperă existența *izomerilor*, specii nucleare cu Z și A identice, dar cu timpi de viață τ diferiți (${}^{234}_{91}\text{Pa}$ cu $\tau_1 = 6,7$ h și ${}^{234}_{91}\text{Pa}$ cu $\tau_2 = 1,12$ min).

Această mare diversitate de specii nucleare poate fi caracterizată, așa cum s-a menționat, și prin alte mărimi fizice cum sînt : masa proprie m a nucleului, energia sa de legătură W_{leg} , spinul nuclear I , dimensiunea (raza R) și forma (nesfericitatea $\frac{\delta R}{R}$) nucleului, momentul magnetic μ_I și momentul de cvadrupol Q , comportarea statistică și paritatea P etc., la care trebuie să fie adăugate o serie de variabile care descriu stările energetice fundamentale și excitate ale nucleului, cum sînt numerele cuantice principal n , orbital l , intern j etc.

1. Masa proprie a nucleului $m(Z, A)$. Cunoașterea structurii protono-neutronice a nucleului precum și a maselor proprii ale celor doi nucleoni

$$m_p = 1836,1 \quad m_e = 1,67265 \cdot 10^{-24} \text{ kg} = 1,007276 \text{ u} \quad (12.2.1)$$

$$m_p = 1838,7 \quad m_e = 1,67493 \cdot 10^{-24} \text{ kg} = 1,008665 \text{ u}$$

ne permite să aflăm o așa-zisă „masă calculată” m^c a nucleului

$$m^c = Zm_p + (A - Z)m_n. \quad (12.2.2)$$

În același timp, însă, masa nucleului poate fi determinată din masa izotopică m_x , prin scăderea masei celor Z electroni atomici. Desigur că aceasta din urmă va fi adevărata masă proprie a nucleului

$$m(Z, A) = m_x - Zm_e. \quad (12.2.3)$$

Se constată că întotdeauna între cele două valori există o diferență pozitivă

$$\Delta m = m^c - m(Z, A) > 0. \quad (12.2.4)$$

Prin urmare, întotdeauna masa proprie a celor A nucleoni (Z protoni și $A - Z$ neutroni) este mai mare decât masa proprie a nucleului constituit din Z protoni și $A - Z$ neutroni; diferența de masă Δm va fi, potrivit teoriei relativității restrânse, tocmai măsura energiei lor de legătură W_{leg} în nucleu — o expresie a stabilității acestuia.

Există mai multe metode de determinare a maselor nucleare proprii, dintre acestea remarcându-se în mod deosebit metoda *spectrometriei de masă* și metoda *deplasărilor izotopice* ale liniilor spectrale optice. Prin ambele metode se obține masa izotopică m_x , dar ea este practic egală cu masa proprie a nucleului $m(Z, A)$, așa cum rezultă din (12.2.3).

Spectrometria de masă este o metodă de înaltă rezoluție (puterea de rezoluție $m/\Delta m = 10^4 \div 10^6$) și ea permite determinarea cu mare precizie atât a maselor izotopice cât și a abundențelor în natură ale diversilor izotopi. Spectrometria de masă se bazează pe deviația în câmpuri electrice și magnetice a unor fascicule de ioni care conțin diverse specii izotopice. Prin urmare, un spectrometru de masă va fi constituit dintr-o *sursă de ioni*, în care prin anumite procedee (termice, bombardament electronic sau ionic, descărcări în arc sau scînteie electrică) se obțin fascicule de ioni cu sarcini specifice Q_s diferite ($Q_s = ne/m_x$; $n = 1, 2, 3, \dots$), un sistem de dispersie și un detector de ioni.

Surselor de ioni li se atașează *filtre*, care selectează microparticulele fie după viteze (filtre de viteze), fie după impuls (filtre de impuls), fie după energia lor cinetică (filtre de energie). În figura 12.2.2 este prezentat un filtru de energie, care este format dintr-un condensator electric cu armături cilindrice, căruia i s-au asociat două fante F_1 (de intrare) și F_2 (de ieșire). Se constată că prin fanta F_2 vor ieși numai acele microparticule pentru care este satisfăcută condiția

$$neE = \frac{mv^2}{R} \quad (12.2.5)$$

respectiv

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{1}{2} neER. \quad (12.2.6)$$

De notat că un astfel de filtru asigură și o bună focalizare a fasciculului de microparticule, dacă unghiul α este de 127° [32, 78].

În figura 12.2.3 este schițat un filtru de impuls, cu filtraj realizat prin acțiunea unui câmp de inducție magnetică \mathbf{B} , omogen și transversal,

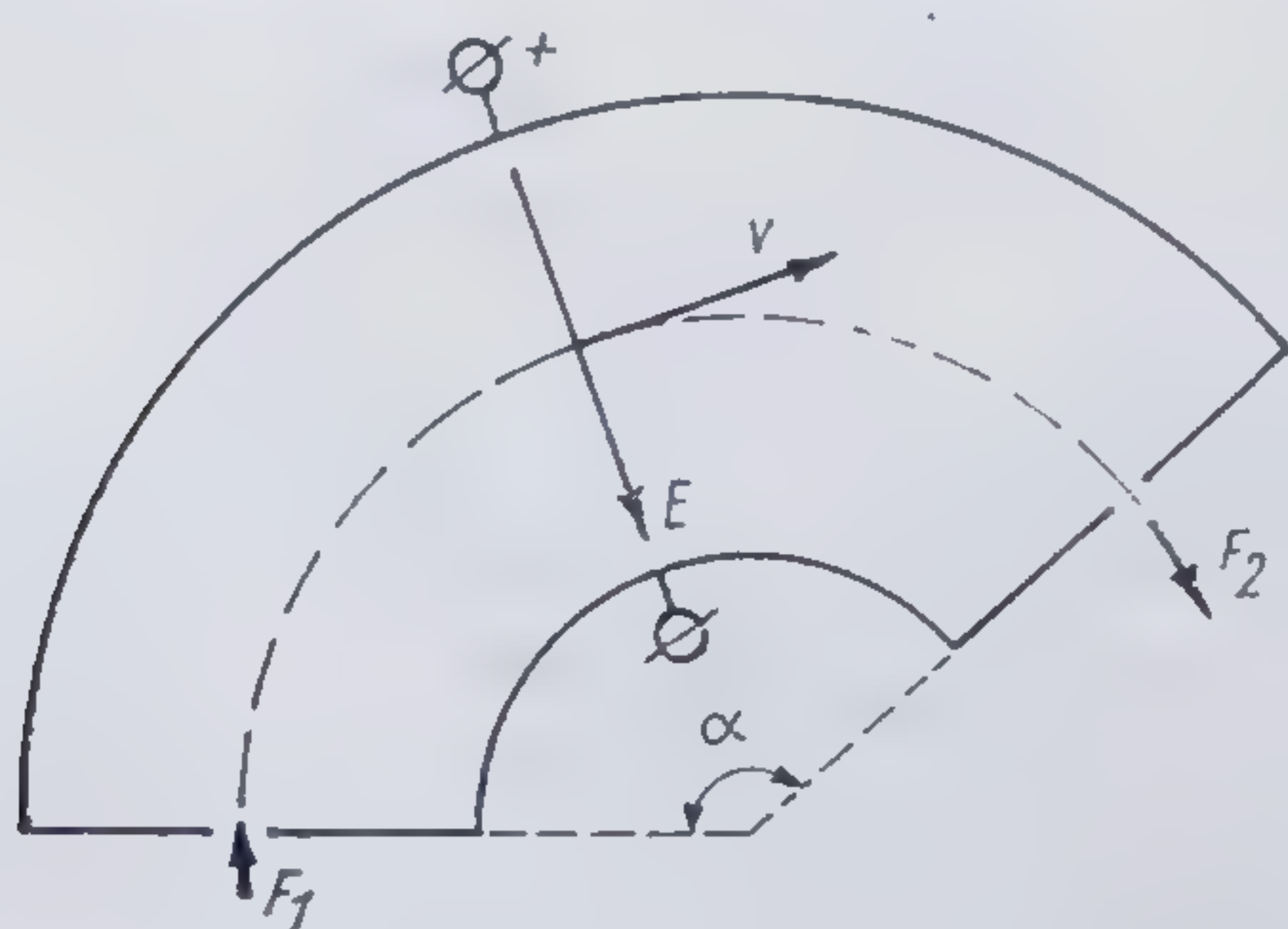


Fig. 12.2.2

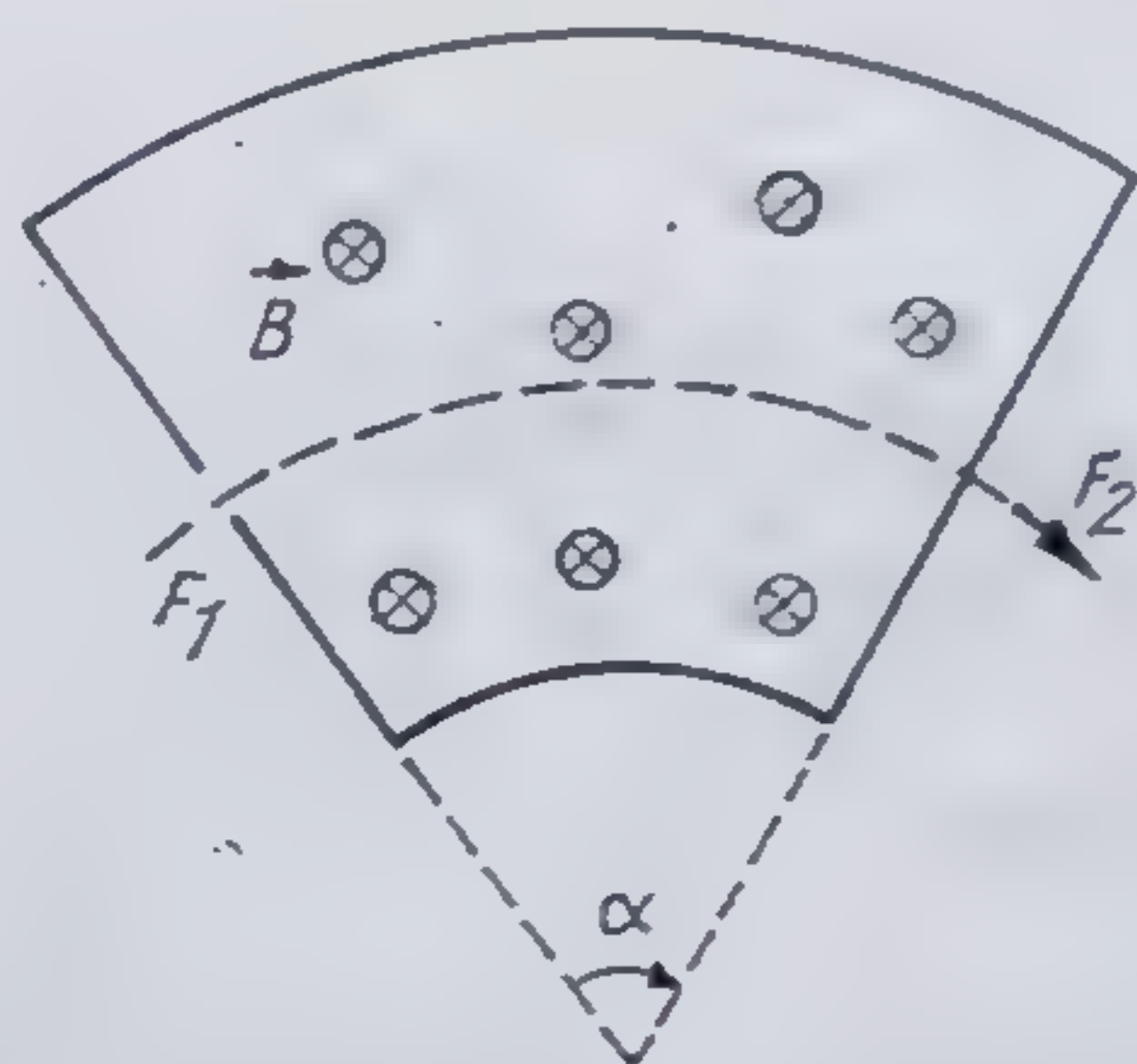


Fig. 12.2.3

care acționează pe un sector circular de deschidere α (de obicei $\alpha = 60^\circ$) și de cele două fante F_1 și F_2 , iar în figura 12.2.4 este prezentat un filtru de viteze, realizat de acțiunea concomitentă a două câmpuri omogene \mathbf{E} și \mathbf{B} , reciproc perpendiculare și de cele două fante F_1 și F_2 .

Se observă că în primul caz

$$\frac{mv^2}{R} = nevB \Rightarrow mv = neBR \quad (12.2.7)$$

iar în al doilea caz

$$neE = nevB \Rightarrow v = \frac{E}{B}. \quad (12.2.8)$$

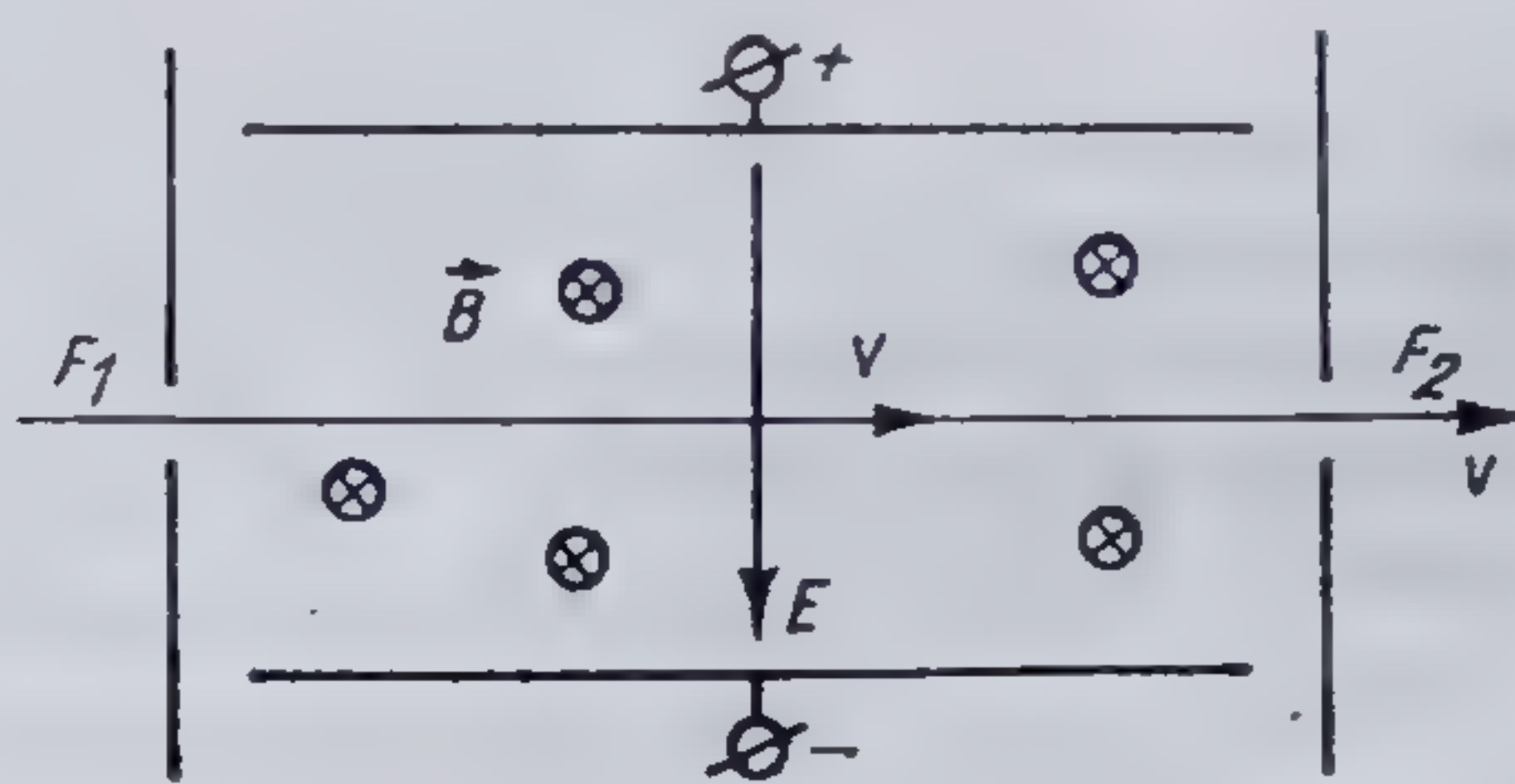


Fig. 12.2.4

Se poate constata ușor că dacă printr-un filtru de impuls, căruia i se înlătură fantele, este trecut un fascicul format din izotopi de diverse sarcini specifice Q_s , dar de aceeași viteză v , atunci sub acțiunea câmpului magnetic transversal \mathbf{B} se va produce o separare (dispersie) a fasciculului în componentele sale izotopice, fiecare componentă focalizându-se separat pe o placă fotografică sau pe un detector. Se obține astfel un *spectrograf*,

respectiv un *spectrometru de masă*. Primul spectograf de masă a fost realizat de către Aston în perioada 1918—1921.

Astăzi există o mare diversitate de spectrometre de masă [78], în figura 12.2.5 fiind schițat spectrometrul de tip Bainridge-Jordan,

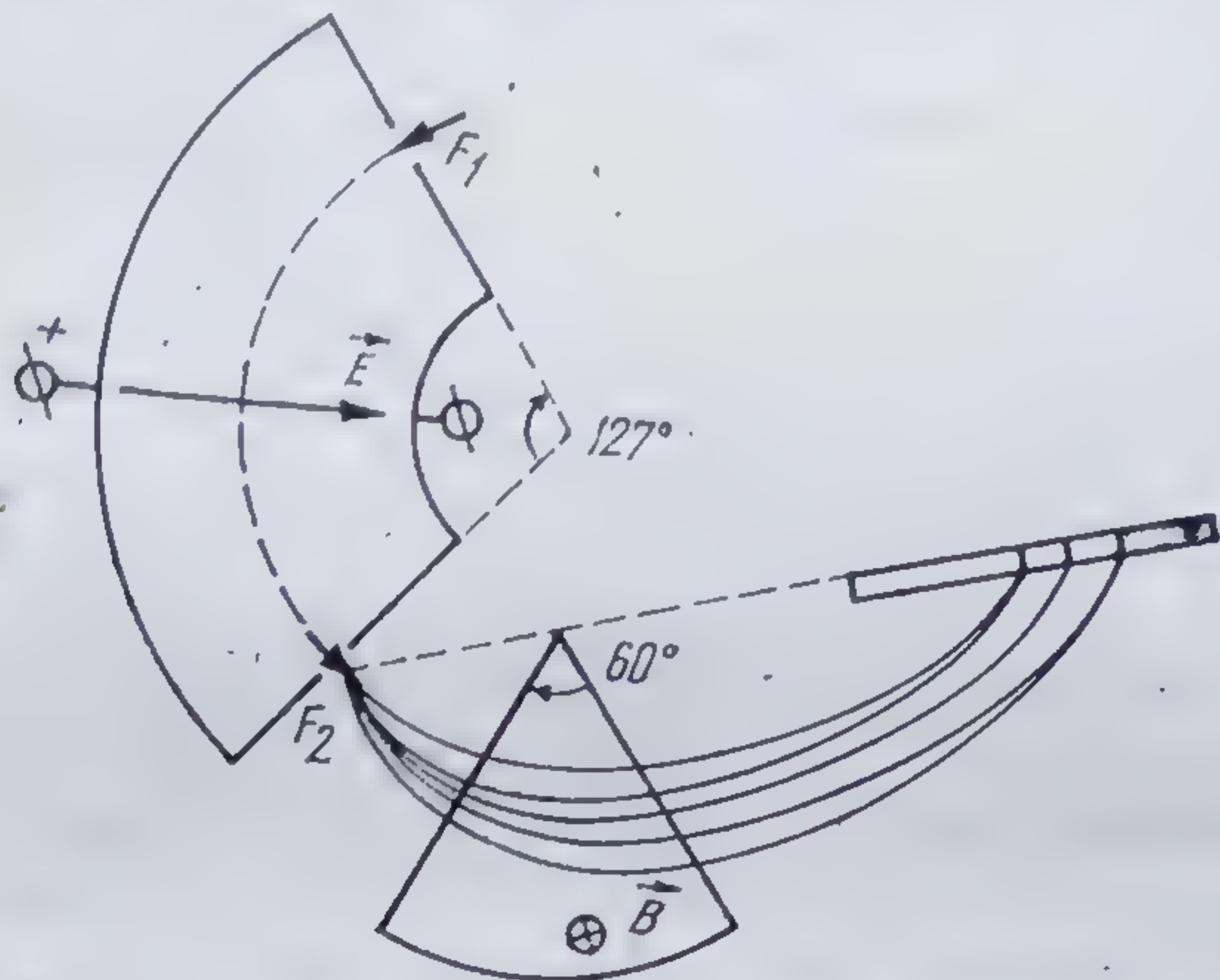


Fig. 12.2.5

care asigură puteri de rezoluție de ordinul lui 10^4 . Există însă, așa cum s-a menționat mai sus, și spectrometre de masă cu puteri de rezoluție de $10^6 \div 10^7$ și deci cu care masa izotopică se poate determina cu mare precizie. Cîteva astfel de valori sînt trecute în tabelul următor.

izotopul	$m_x[u]$	izotopul	$m_x[u]$	izotopul	$m_x[u]$
^1_1H	1,0078213	^3_2He	3,016014	$^{16}_8\text{O}$	15,99491
^2_1D	2,0140931	^4_2He	4,0025988	$^{44}_{20}\text{Ca}$	43,95549
^3_1T	3,016094	^7_3Li	7,01601	$^{210}_{84}\text{Po}$	209,98297

Studiul intensităților relative ale liniilor unui spectru de masă oferă informații asupra *abundenței naturale a izotopilor* stabili din pleiada ce constituie un element chimic. În tabelul de mai jos sînt prezentate cîteva astfel de abundențe pentru izotopii stabili de importanță practică deosebită.

Elementul	X	%	X	%	X	%	X	%
Hidrogen	^1_1H	99,985	^2_1D	0,015				
Carbon	$^{12}_6\text{C}$	99	$^{13}_6\text{C}$	1,1				
Azot	$^{14}_7\text{N}$	99,64	$^{15}_7\text{N}$	0,36				
Oxigen	$^{16}_8\text{O}$	99,88	$^{17}_8\text{O}$	0,04	$^{18}_8\text{O}$	0,08		
Potasiu	$^{39}_{19}\text{K}$	93	$^{41}_{19}\text{K}$	6,7				
Fier	$^{54}_{26}\text{Fe}$	5,8	$^{56}_{26}\text{Fe}$	92	$^{57}_{26}\text{Fe}$	2,2	$^{58}_{26}\text{Fe}$	0,34
Uraniu	$^{238}_{92}\text{U}$	0,72	$^{235}_{92}\text{U}$	99,3				

Metodele optice de determinare a maselor izotopice se bazează pe dependența constantei lui Rydberg R , din formula seriilor spectrale (8.3.40), de masa nucleului. La atomii hidrogenoizi, de exemplu, înlocuind în expresia (8.3.41) masa de repaus m_e a electronului prin masa redusă $\mu = m_e m_x / (m_e + m_x)$ se obține

$$R = \frac{\mu}{m_e} R_\infty = \frac{m_x}{m_e + m_x} R_\infty \quad (12.2.9)$$

rezultat care pune în evidență o dependență a frecvenței liniilor spectrale de masa izotopică m_x . Se obțin astfel „deplasări izotopice” ale liniilor spectrale care au valori de ordinul ăngströmului ($\Delta\lambda = \lambda_{1H} - \lambda_{2D} = 1,78 \text{ \AA}$ pentru prima linie din seria Balmer a hidrogenului și $\Delta\lambda = \lambda_{238U} - \lambda_{235U} = 0,251 \text{ \AA}$ în cazul uraniului. Aceste deplasări pot fi măsurate cu mare precizie și din valoarea lor se determină masa m_x .

2. **Energia de legătură W_{leg} a nucleului.** Această mărime se definește fie ca energia necesară pentru descompunerea nucleului în particulele sale componente, respectiv în Z protoni și $A - Z$ neutroni, fie ca energia ce se eliberează la formarea unui nucleu atomic din Z protoni și $A - Z$ neutroni. Avînd în vedere că în cadrul nucleului, nucleonii interacționează între ei prin puternice forțe de atracție, căroră le corespunde o energie potențială negativă, respectiv că nucleonii execută mișcări de translație și de rotație evidențiate de prezența unor momente cinetice orbitale și de spin, mișcări căroră le va corespunde o energie cinetică pozitivă, rezultă că energia de legătură W_{leg} a unui nucleu se poate defini și ca diferența dintre aceste două energii, luate fiecare în valoare absolută. Energia de legătură W_{leg} ar trebui să aibă desigur o valoare negativă, întrucît pentru sisteme legate energia potențială este întotdeauna mai mare, în valoare absolută decît energia cinetică a constituentilor, dar ea se definește în valoare absolută ($W_{leg} > 0$). De aceea, captarea nucleonilor de către nucleu va fi însoțită de o degajare de energie (energie tocmai egală cu energia lui de legătură). O astfel de concluzie este de mare însemnătate pentru studiul unor procese nucleare, cum este de exemplu fisiunea nucleară sub acțiunea neutronilor termici, care, captați fiind de către nucleu, vor ceda acestuia energia lor de legătură și-l vor aduce într-o stare puternic excitată.

Mai sus s-a menționat că energia de legătură a nucleului atomic poate fi determinată dacă se cunoaște masa nucleară $m(Z, A)$. În acest scop se folosește relația teoriei relativității restrînse (3.6.12), care leagă energia de masă. Se va obține expresia

$$W_{leg} = [Zm_p + (A - Z) \cdot m_n - m(Z, A)]c^2 \quad (12.2.10)$$

în care dacă masele proprii m_x sînt exprimate în unități atomice de masă, rezultatul va fi convertit direct în megaelectron-volți, prin intermediul relației

$$W_{leg} = 931,502 \cdot \Delta m \text{ [MeV]}. \quad (12.2.11)$$

Pe baza acestei relații se obține, pentru heliu, de exemplu, valoarea

$$W_{leg} = [2 \cdot 1,007276 + 2 \cdot 1,008665 - 4,002598] \cdot 931,502 \simeq 28 \text{ MeV}$$

care coincide suficient de bine cu valorile obținute prin alte metode.

În tabelul următor sînt prezentate valorile energiei de legătură W_{leg} și ale energiei de legătură pe nucleon $W_{leg}/A = B$ pentru cîteva nucleo :

Nucleid	1_1p	1_0n	2_1D	3_1T	3_2He	4_2He	6_3Li	7_3Li	${}^{27}_{13}Al$	${}^{56}_{26}Fe$	${}^{209}_{83}Bi$	${}^{238}_{92}U$
$W_{leg}(\text{MeV})$	0	0	2,12	8,48	7,32	28,3	32	39,2	225	490	1640	1802
$B = \frac{W_{leg}}{A}(\text{MeV})$	0	0	1,11	2,83	2,57	7,07	5,33	5,70	8,40	8,75	7,84	7,58

Trebuie notat că măsurătorile de masă izotopică au pus în evidență de la început existența unor diferențe între masa m , exprimată în unități atomice de masă și numărul de masă A , diferențe care prezintă anumite variații de la nucleu la nucleu, în cadrul sistemului periodic al elementelor. Aston este primul care urmărește aceste variații și, pentru a le putea studia, introduce noțiunile de *fracție de îngrămădire* P

$$P = \frac{m - A}{A} \quad (12.2.12)$$

respectiv de *defect de masă* Δ

$$\Delta = \frac{m}{\frac{1}{12} m_{12C}} - A. \quad (12.2.13)$$

În figurile 12.2.6 și 12.2.7 sînt reprezentate grafic aceste variații. Desigur că cele două mărimi P și Δ vor avea valori nule pentru izotopul ${}^{12}_6C$ și, de aceea, defectul de masă Δ , definit prin (12.2.13), nu va exprima cantitativ, ci numai calitativ energia de legătură nucleară (altfel ar trebui ca nucleul de ${}^{12}_6C$ să posede o energie de legătură nulă).

Fracția de îngrămădire P are o valoare minimă pentru $A = 58 - 60$, care corespunde izotopilor fierului. De asemenea, P are valori negative, pentru $20 < A < 170$. O formă asemănătoare va avea desigur și curba de dependență a defectului de masă Δ funcție de A (vezi fig. 12.2.7).

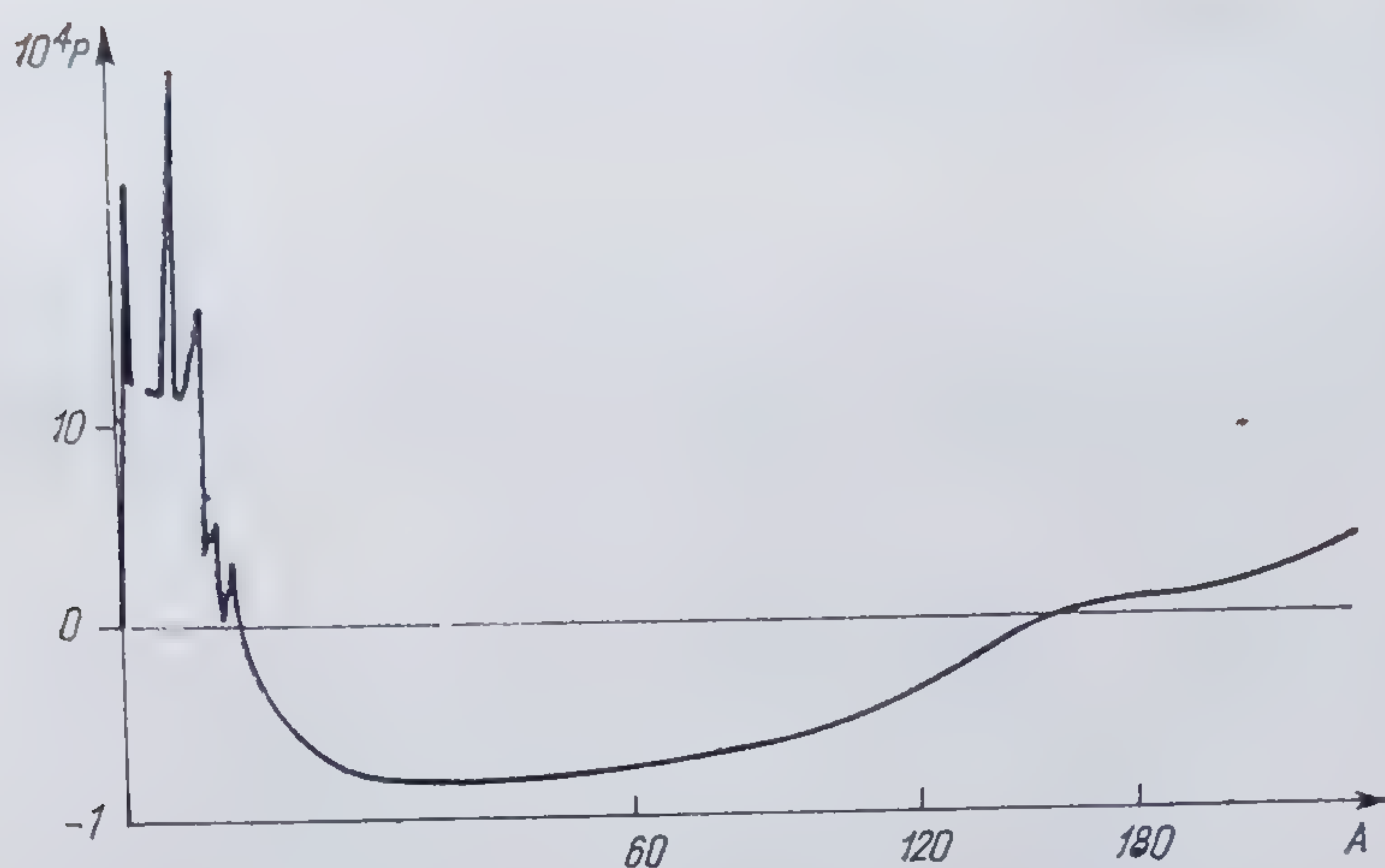


Fig. 12.2.6

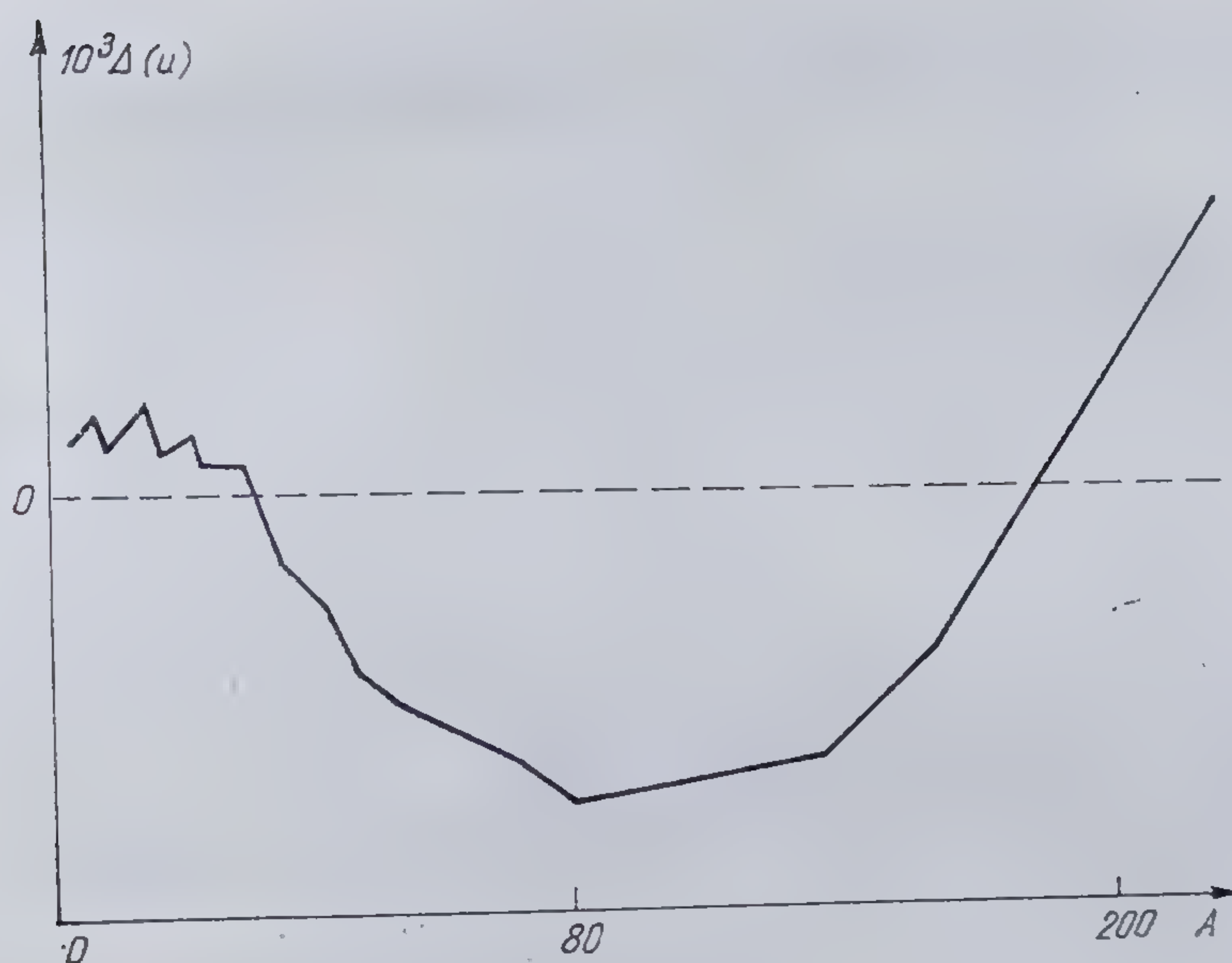


Fig. 12.2.7

În figura 12.2.8 este reprezentată grafic dependența energiei de legătură pe nucleon B , de numărul A de nucleoni din nucleu. Energia pe nucleon B poate fi calculată cu ajutorul expresiei

$$B = \frac{W_{leg}}{A} = (m_n - 1) - \frac{Z}{A} (m_n - m_p) - P \quad (12.2.14)$$

care cu valorile din (12.2.1) ia forma [108]

$$B = 0,008665 - 0,001389 \frac{Z}{A} - P. \quad (12.2.15)$$

De remarcă că dependența energiei de legătură pe nucleon de numărul nucleonilor oferă o serie de informații interesante asupra proprietăților fizice ale nucleului. În primul rând, se observă de pe graficul din fig. 12.2.8 că pentru primele 28 de nuclee intervine o variație periodică a

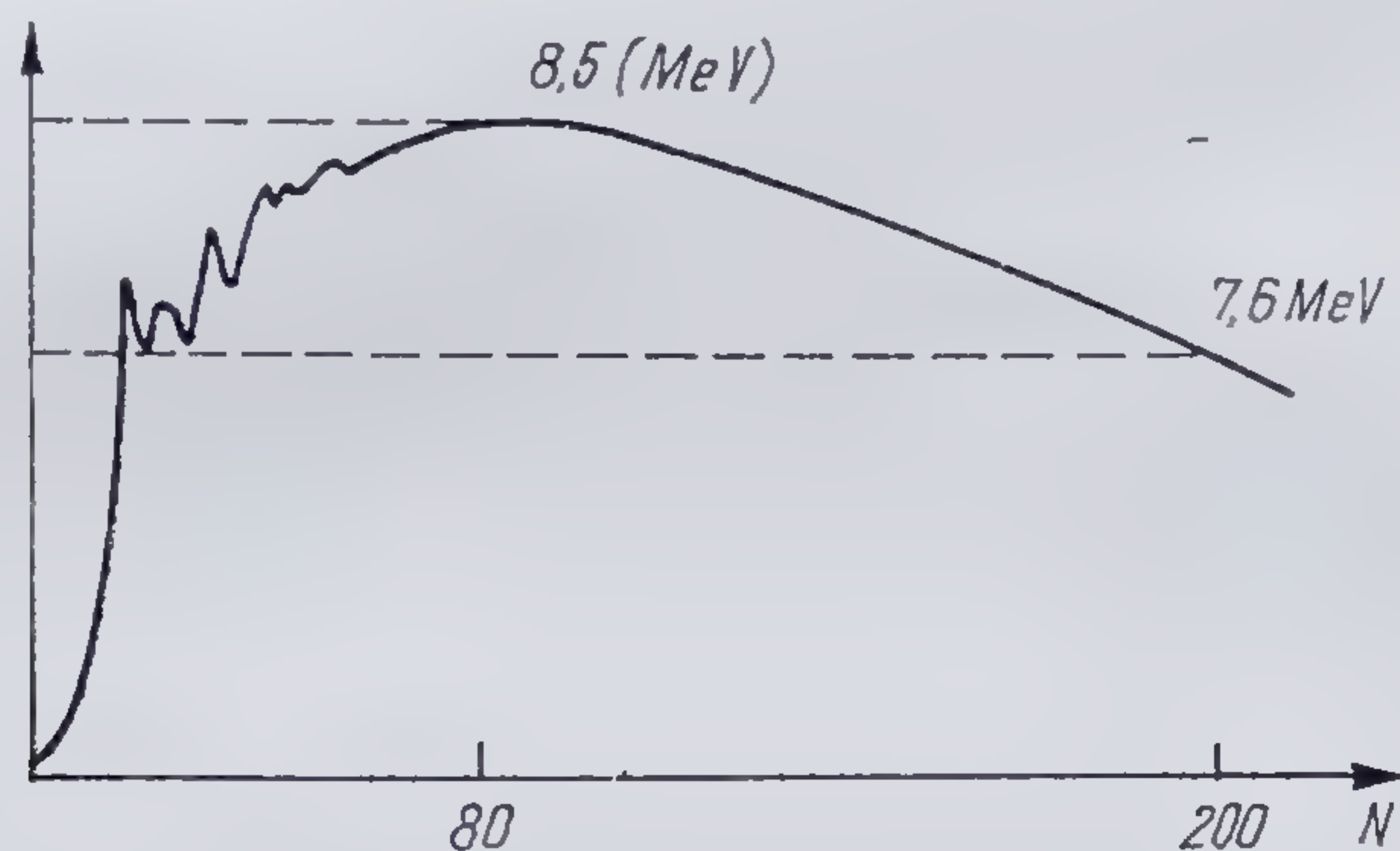


Fig. 12.2.8

lui B cu A , având perioada $A = 4$. Într-adevăr, nucleele cu $A = 4, 8, 12, 16, 20, 24, 28$ posedă o energie de legătură pe nucleu B mai mare decât celelalte nuclee. Înseamnă că formațiile nucleare compuse din câte 2 protoni și 2 neutroni (formații care sînt de tip particulă α sau nucleu de heliu) prezintă o stabilitate mai ridicată decât formațiile compuse din alte numere de nucleoni, așa încît s-ar putea spune că particulele α „preexistă” în nucleu. Acest punct de vedere ne va permite să înțelegem procesul de dezintegrare α (vezi § 12.5), dar o astfel de imagine nu este decît calitativă, întrucît începînd cu $A = 36$ apar primii izobari stabili, iar periodicitatea de 4 se strică. Au fost puse însă în evidență valori mai mari ale energiei de legătură pe nucleon și pentru nucleele la care Z sau $A - Z$ sînt egale cu numerele 50, 82, și 126, numere care împreună cu 4, 8, 20, au primit denumirea de *numere magice*. Existența acestor numere magice a condus la formularea *modelului în pături* al nucleului atomic.

În al doilea rînd, dacă se reprezintă grafic masa de repaus a izobarilor funcție de numărul lor de ordine Z se obțin dependențe de formă parabolică (fig. 12.2.9), masa minimă, respectiv stabilitatea maximă obținîndu-se pentru izobarul al cărui $Z_0 \simeq A/2$. Experiența arată că toți izobarii cu $Z \neq Z_0$ sînt radioactivi și prin dezintegrări β^- sau β^+ trec treptat în izobarul cu $Z = Z_0$. Uneori nu există un singur izobar stabil cu $Z = Z_0$, ci doi izobari stabili cu Z apropiat de Z_0 . Dar, toți izobarii corespunzători unor numere magice se plasează mult sub aceste parabole, evidențiindu-se și pe această cale stabilitatea lor mărită.

Dependențele parabolice de Z ale maselor izobarilor sînt diferite pentru nucleele par-pare ($Z=\text{par}$, $N=\text{par}$), față de cele pentru nucleele par-impare, respectiv impar-impare ($Z=\text{impar}$; $N=\text{impar}$), așa

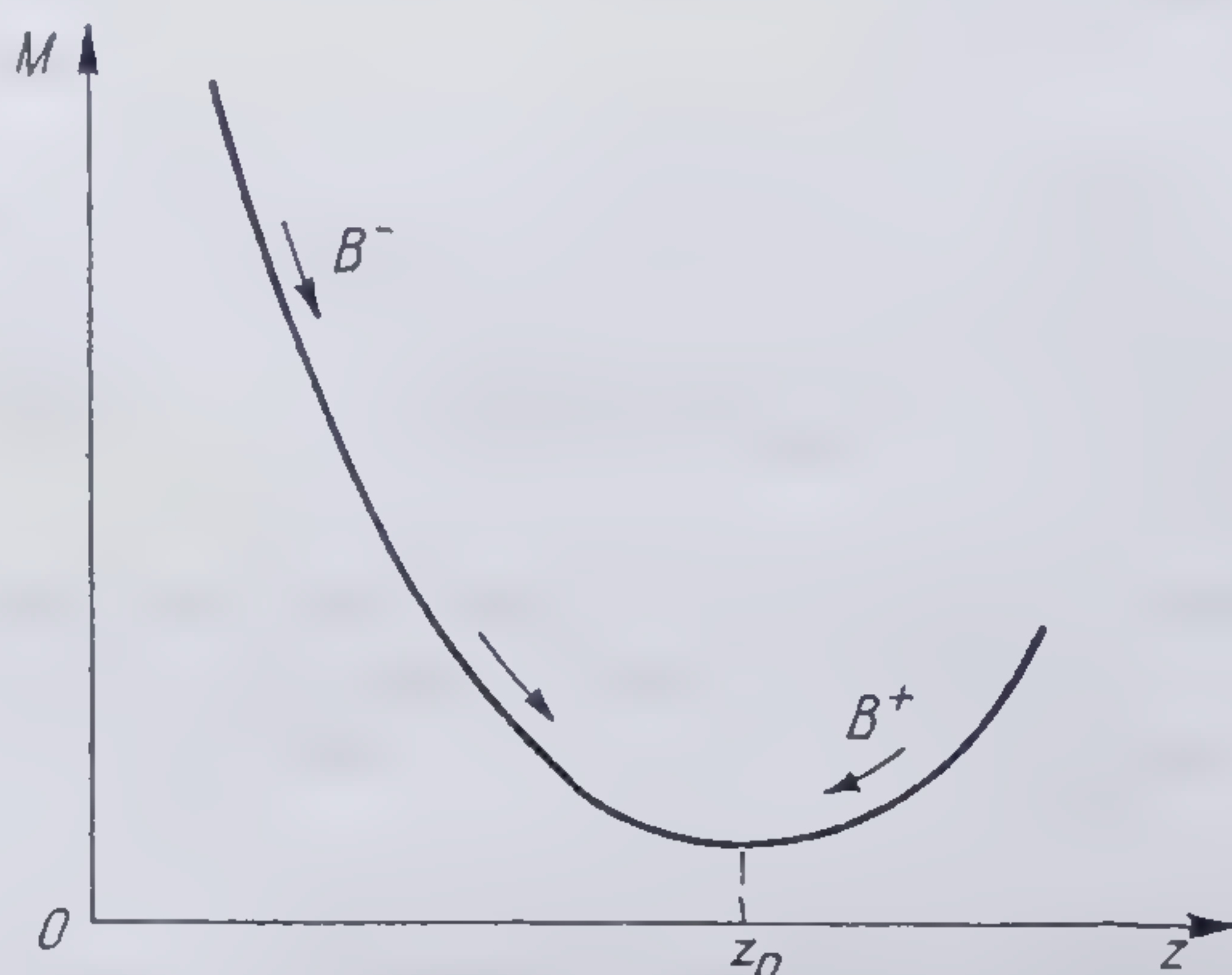


Fig. 12.2.9

cum se observă de pe figura 12.2.10. La nucleele par-pare intervine o energie de legătură suplimentară, de valoare $\delta(Z,A)$, față de energia de legătură a nucleelor par-impare, iar la cele impar-impare energia de legătură este mai scăzută cu $\delta(Z,A)$ decît a celor par-impare. Și acest rezultat evidențiază într-un fel stabilitatea mărită a formațiilor de patru nucleoni despre care s-a pomenit mai sus, mărimea $\delta(Z,A)$ fiind cunos-

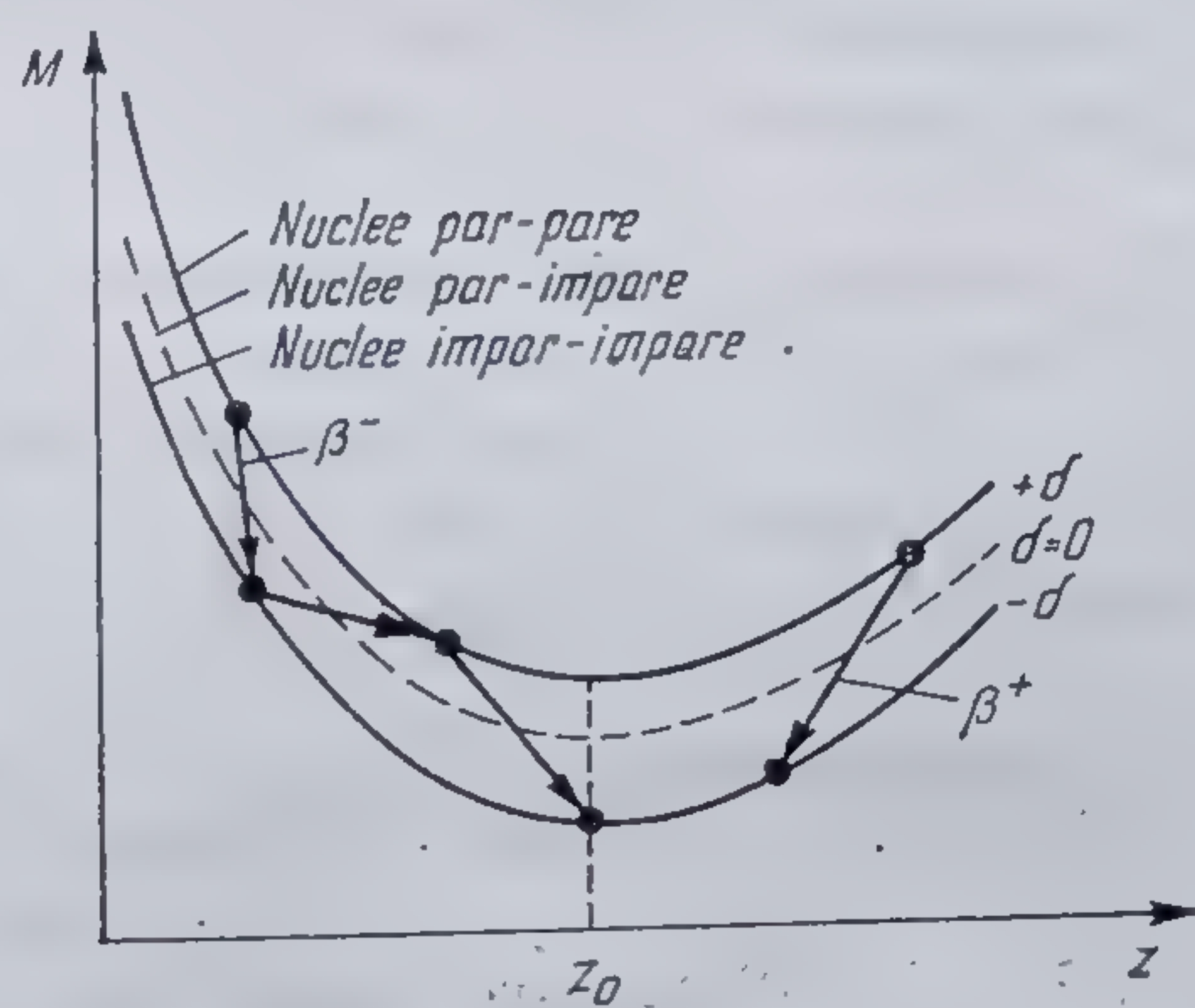


Fig. 12.2.10

cută sub denumirea de *energie de împachetare*. Pe cale fenomenologică s-a demonstrat că :

$$\delta(Z,A) = \begin{cases} +12/A^{4/3} \text{ MeV} & \text{pentru nuclee par-par} \\ 0 & \text{pentru nuclee par-impare} \\ -12/A^{4/3} \text{ MeV} & \text{pentru nuclee impar-impare.} \end{cases} \quad (12.2.15)$$

Un interesant aspect al variației energiei de legătură pe nucleon, funcție de A , îl reprezintă faptul că pentru nucleele ușoare, ca și pentru cele grele, valoarea acestei mărimi este cu aproximativ 1 MeV mai scăzută decât pentru nucleele mijlocii. Astfel, pentru $^{56}_{26}\text{Fe}$, $B = 8,75$ MeV, în timp ce la $^{238}_{92}\text{U}$, $B = 7,58$ MeV, iar la ^4_2He , $B = 7,07$ MeV. De remarcat că intrucît nucleul de heliu (particula $^4_2\alpha$) posedă o energie de legătură pe nucleon de 7,07 MeV, ar trebui să intervină o descompunere spontană a nucleelor în particule α , la energii de legătură pe nucleon sub această valoare. Un astfel de proces este într-adevăr real, fiind evidențiat de faptul că pe măsură ce B se apropie de limita a 7,07 MeV, nucleele devin tot mai α -active.

O altă concluzie importantă care se desprinde din cele de mai sus constă în aceea că procesele de fisiune ale nucleelor grele, ca și cele de fuziune ale nucleelor ușoare, care conduc la formarea unor nuclee mijlocii cu energie de legătură de valori superioare primelor, vor trebui să fie însoțite de o degajare de energie, adică vor fi *procese exoenergetice*. Această concluzie este de mare importanță practică, stînd la baza energeticii nucleare.

În sfîrșit, din considerentul că pentru majoritatea nucleelor atomice energia de legătură pe nucleon are aproximativ aceeași valoare de 8,5 MeV, rezultă că forțele nucleare nu depind de numărul nucleonilor din nucleu.

Într-adevăr, în caz contrar, între A nucleoni s-ar stabili $\frac{1}{2}A(A-1)$

legături, iar energia B ar trebui să crească liniar cu A . Se desprinde deci concluzia că *forțele nucleare sînt forțe cu rază scurtă de acțiune*, în sensul că un nucleon interacționează numai cu primii săi vecini din nucleu, aflați în *sfera acțiunii sale nucleare*, sferă care are o rază $R_0 = 1,45 - 1,5$ fm.

3. **Spinul nuclear** este o variabilă dinamică cuantică intrinsecă a nucleului, ca și spinul electronic și a fost introdusă în anul 1924 de către W. Pauli, din considerente de ordin experimental, legate de așa-numita *structură hiperfină a liniilor spectrale*, situație întrutotul analogă celei care a determinat introducerea, în anul 1920, a spinului electronic (vezi § 8.11).

În figura 12.2.11 este prezentată structura fină și hiperfină a liniei galbene din spectrul sodiului. Se observă că fiecare dintre componentele structurii fine (a dubletului sodiului $\lambda_1 = 5890$ Å, care corespunde tranziției $3^2P_{3/2} \rightarrow 3^2S_{1/2}$ și $\lambda_2 = 5898$ Å, care corespunde tranziției $3^2P_{1/2} \rightarrow 3^2S_{1/2}$) se despică la rîndul ei în componente hiperfine, distanțate între ele cu cîteva sutimi de ångströmi.

De notat că o astfel de structură hiperfină apare la majoritatea spectrelor optice, valoarea despicărilor depinzînd de numărul de masă A al respectivilor izotopi. Acest „efect izotopic” l-a condus pe Pauli la concluzia că structura hiperfină a liniilor spectrale apare ca urmare a interacției electronilor optici cu nucleul, interacție ce poate fi de natură dipolar-magnetică sau de natură cvadrupolar-electrică. La nucleele

ușoare intervine numai primul tip de interacție (momentul de cvadrupol al acestor nuclee fiind nul) și de aceea, Pauli a reușit să explice structura hiperfină a dubletului sodiului prin introducerea noțiunii de *spin nuclear* $\langle L_I \rangle$ și de *moment magnetic de spin nuclear* $\langle \mu_I \rangle$.

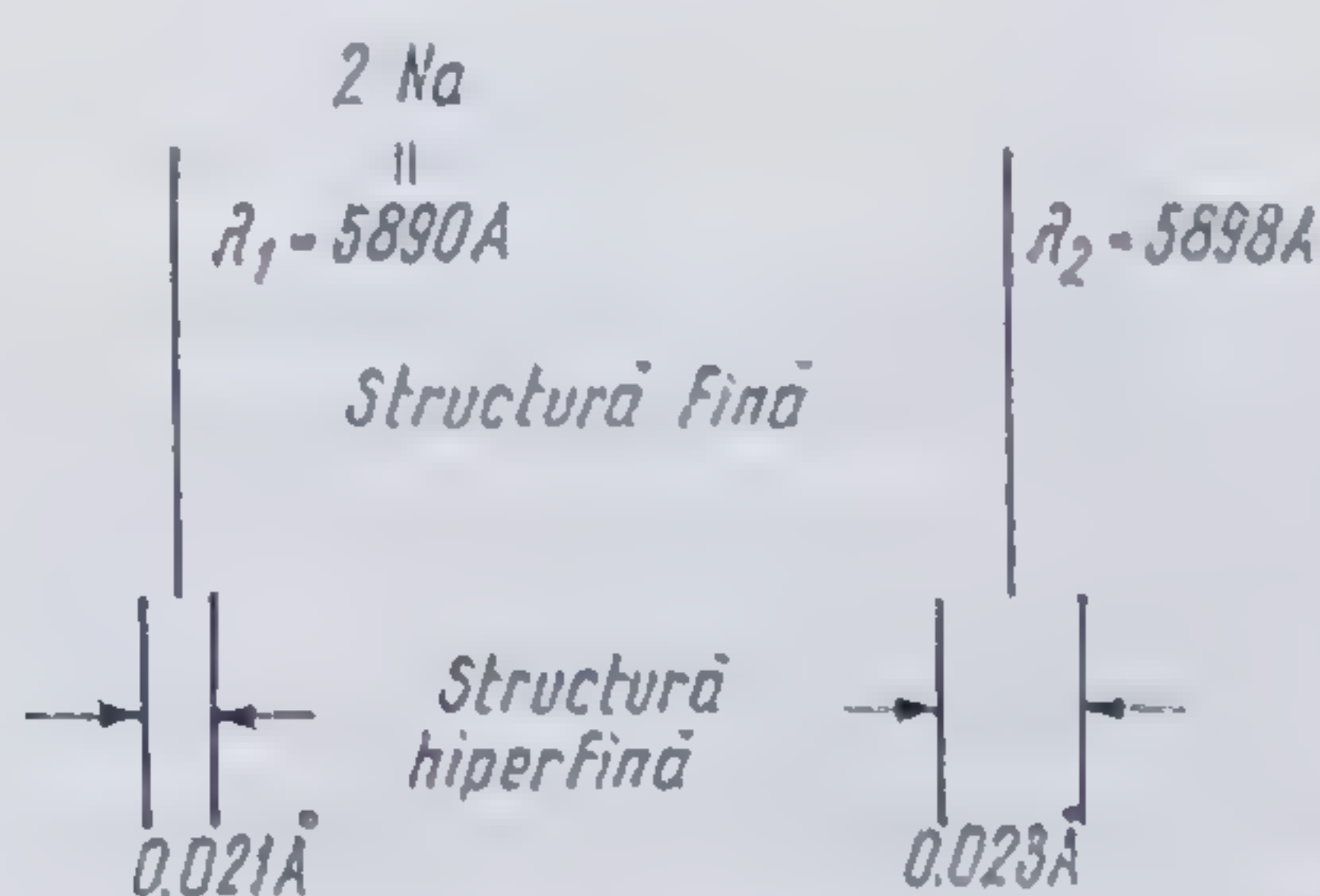


Fig. 12.2.11

Desigur, spinul nuclear este conceput (la fel ca cel electronic), ca un moment cinetic propriu al nucleului, respectiv al nucleonilor din nucleu, de proveniență relativistă, ale cărui valori proprii sînt date de expresia

$$\langle L_I \rangle = \hbar \sqrt{I(I+1)} \quad (12.2.16)$$

I fiind *numărul cuantic de spin*. De menționat că adesea spinul nuclear se exprimă, formal, numai prin numărul cuantic de spin I . Este util, de asemenea, să introducem și o componentă z a spinului nuclear, $\langle L_I \rangle_z$, ale cărei valori cuantificate sînt date de expresia

$$\langle L_I \rangle_z = \hbar m_I; \quad m_I = 0, \dots, \pm I \quad (12.2.17)$$

m_I fiind *numărul cuantic magnetic de spin*, deoarece cu ajutorul acestei variabile se poate defini o componentă z a momentului magnetic nuclear de spin

$$\langle \mu_I \rangle_z = \gamma_I \langle L_I \rangle_z = \frac{e\hbar}{m_p} \cdot m_I \quad (12.2.18)$$

respectiv un *magneton nuclear* μ_N , avînd valoarea

$$\mu_N = \frac{m_e}{m_p} \mu_B = \frac{\mu_B}{1836,1} \simeq 5,6 \cdot 10^{-27} \text{ J/T} \quad (12.2.19)$$

Faptul că magnetonul nuclear μ_N este de aproape 2000 de ori mai mic decît magnetonul Bohr μ_B ne arată că participarea nucleelor atomice la proprietățile magnetice ale substanțelor este neglijabilă, într-o primă aproximație, rămînînd deschisă posibilitatea de a exista și situații în care magnetismul nuclear să se poată releva în mod intrinsec. Astfel de situații se întîlnesc la moleculele de parahidrogen, ale căror momente

magnetice electronice de spin și orbitale sînt nule și de aceea, aceste molecule vor prezenta un paramagnetism nuclear pur, dat de protonii nucleari ai hidrogenului. Acest paramagnetism se evidențiază îndeosebi la temperaturi scăzute, comportîndu-se conform legii lui Curie (vezi (6.8.111))

$$\chi = \frac{N\langle\mu_p\rangle^2\mu_0}{3k_bT} = \frac{C}{T} \quad (12.2.20)$$

Dar măsurătorile de susceptibilitate magnetică au condus la un rezultat surprinzător și anume că momentul magnetic al protonului nu este egal cu un magneton nuclear, ci are valoarea

$$\langle\mu_p\rangle = 2,79276 \mu_N. \quad (12.2.21)$$

Înseamnă că introducînd și aici un factor Landé g_I , dintr-o expresie de forma

$$\langle\mu_p\rangle = g_I\mu_N m_I; \quad m_I = \pm I, \quad (12.2.22)$$

rezultă că pentru proton, numărul cuantic de spin I și factorul Landé g_I au valorile

$$I = \frac{1}{2}; \quad g_I \neq 2 \quad (12.2.23)$$

(să ne reamintim că la electron $s = 1/2$ și $g_s = 2$).

Și mai surprinzător a fost rezultatul pe care l-a obținut Rabi, în anul 1932, cînd a constatat că și neutronul posedă un moment magnetic propriu de spin, de valoare negativă

$$\langle\mu_n\rangle = -1,91298 \mu_N. \quad (12.2.24)$$

De remarcat că și în cazul neutronului $I = 1/2$, dar $g \neq 2$.

Dacă avem în vedere că la electron abaterile factorului g_s de la valoarea 2 (puse în evidență de rezonanțele feromagnetice de spin) se pun pe seama interacției spin-orbită (vezi § 11.3), atunci ar trebui ca și în cazul nucleonilor să intervină o astfel de interacție. Dar atunci neutronul și respectiv protonul ar trebui să posedă anumite structuri interne, în cadrul cărora să poată interveni mișcări subcuantice, ale altor particule purtătoare de sarcini electrice. O astfel de concluzie s-a dovedit a fi deosebit de fertilă, deschizînd calea spre teoria, astăzi în curs de constituire, a particulelor subnucleonice (cromodinamica cuantică, vezi § 12.10.6).

Se remarcă, din sumara prezentare făcută mai sus, importanța deosebită pe care o reprezintă cunoașterea spinului nucleelor. Există trei grupuri de metode experimentale care permit determinarea spinului nuclear și anume:

- metodele optice, bazate pe studiul structurii hiperfine a liniilor spectrale;
- metoda rezonanței magnetice în fascicule moleculare;
- metoda rezonanței magnetice nucleare de spin (RMN).

a) *Metodele optice* se bazează pe studiul structurilor hiperfine ale liniilor spectrale. Aceste structuri apar datorită interacțiilor dintre momentele nucleare de spin și electronii optici ai atomului, interacții ce se realizează prin intermediul câmpului magnetic de inducție $B(0)$, pe care acești electroni îl creează în nucleu (acesta fiind presupus în originea O a sistemului de referință). Este vorba, deci, de o interacție de natură dipolar-magnetică*, ce poate fi exprimată printr-un termen energetic de forma (vezi § 10.6)

$$E_{JI} = - \langle \mu_I \rangle \cdot B_J(0) = - \langle \mu_I \rangle_z \cdot B_J(0) \quad (12.2.25)$$

J fiind numărul cuantic atomic intern, de care depinde inducția $B(0)$. În acest caz termenii spectrali atomici vor putea fi dați de suma

$$E_F = E_J + E_{JI} \quad (12.2.26)$$

unde prin F se definește un *număr cuantic atomic total*, ale cărui valori se vor găsi, în cadrul unui „model vectorial”, din expresia

$$\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{I} \quad (12.2.27)$$

deci

$$F = J - I; J - I + 1; \dots, J + I - 1; J + I \quad (12.2.28)$$

ceea ce înseamnă că există $2I + 1$ valori pentru numărul cuantic atomic F . Ele cuantifică valorile unui moment cinetic atomic total

$$\langle L_F \rangle = \hbar \sqrt{F(F+1)}. \quad (12.2.29)$$

Ținând cont de faptul că inducția $B_J(0)$, creată de mișcarea internă a electronilor optici, are direcția și sensul momentului cinetic intern $\langle \mathbf{L}_J \rangle$, ale cărui valori cuantificate sînt date de expresia

$$\langle L_J \rangle = \hbar \sqrt{J(J+1)} \quad (12.2.30)$$

se poate scrie

$$E_{JI} = - \langle \mu_J \rangle \cdot B(0) \cos(\mathbf{J}, \mathbf{I}). \quad (12.2.31)$$

Dar

$$\cos(\mathbf{J}, \mathbf{I}) = \frac{\langle L_F^2 \rangle - \langle L_J^2 \rangle - \langle L_I^2 \rangle}{2 \langle L_I \rangle \langle L_J \rangle} \quad (12.2.32)$$

asa încît, cu

$$\langle \mu_I \rangle = g_I \mu_N \quad (12.2.33)$$

g_I fiind *factorul Landé nuclear*, se va obține

$$E_{JI} = - g_I \mu_N B(0) \frac{F(F+1) - J(J+1) - I(I+1)}{2 \sqrt{J(J+1)I(I+1)}}. \quad (12.2.34)$$

*) În cazul nucleelor grele intervin și interacții de tip cvadrupolar-electric, datorită nesfericității acestor nuclee.

Acesta este termenul spectral corespunzător structurii hiperfine (în lipsa momentului de cvadrupol Q) și pe baza lui pot fi explicate structurile hiperfine ale liniilor spectrale. De exemplu, în cazul sodiului, structura hiperfină pune în evidență că pentru nucleul $^{23}_{11}\text{Na}$, $I = \frac{3}{2}$. În figura 12.2.12 este schițată schema nivelelor energetice ale structurii fine și hiperfine corespunzătoare liniilor galbene ale sodiului.

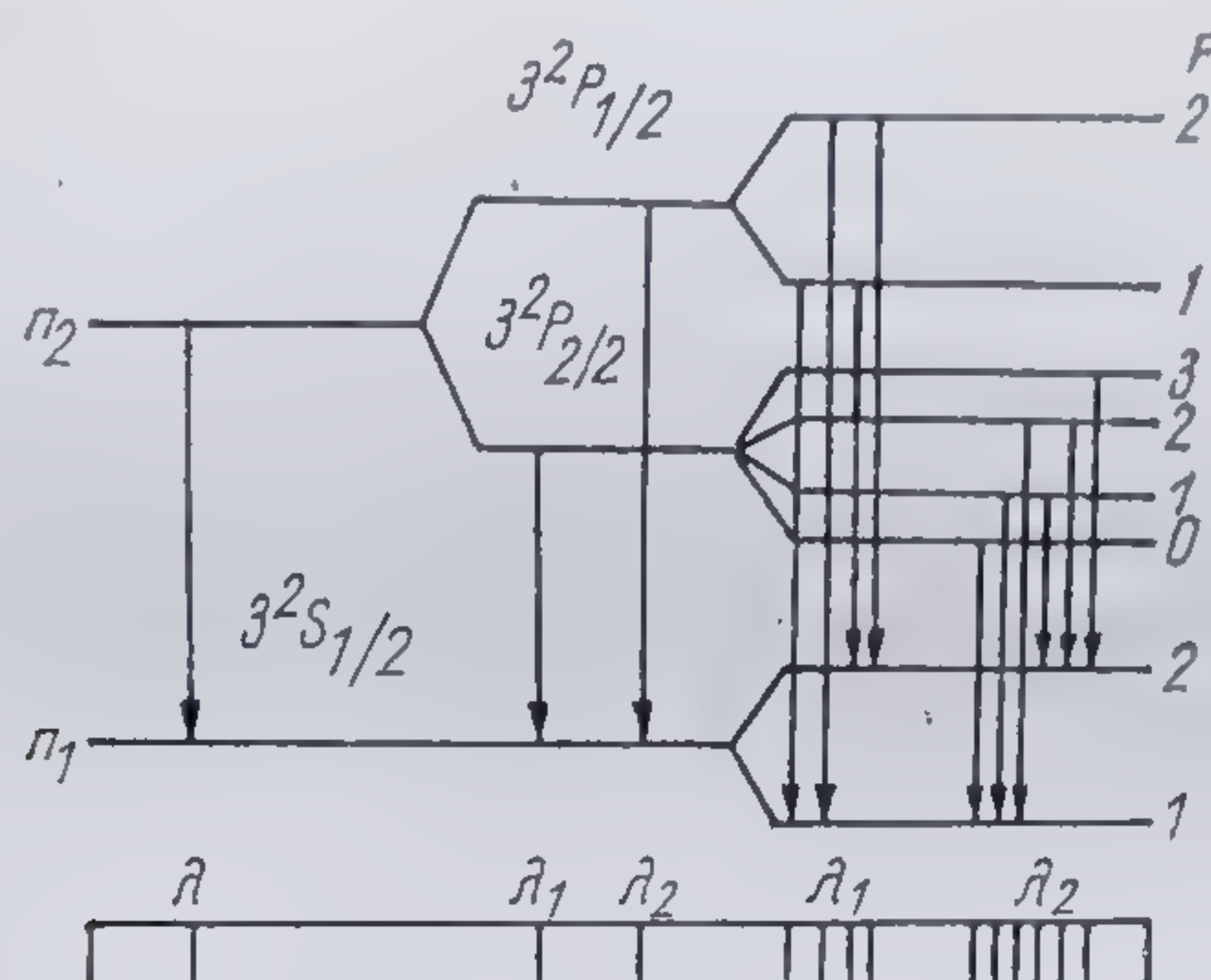


Fig. 12.2.12

De remarcat că intervin și în cazul structurii hiperfine *reguli de selecție* (din motive similare celor precizate în § 10.4), aceste reguli fiind de forma

$$\Delta L = \pm 1; \Delta S = 0; \Delta J = \pm 1; \Delta I = 0; \Delta F = 0, \pm 1.$$

(12.2.35)

Descifrarea structurilor hiperfine este, desigur, o problemă mai complexă decât descifrarea structurilor fine, dar rezolvarea ei a permis găsirea valorilor lui I și g_I pentru majoritatea nucleelor atomice.

b) *Metoda rezonanței magnetice în fascicule nucleare (metoda Rabi)* reprezintă o dezvoltare a metodei Stern-Gerlach (vezi § 8.11) de deviație în câmpuri magnetice cu gradient (câmpuri neomogene) a fasciculelor de microparticule purtătoare de momente magnetice și constă în combinarea a două astfel de deviații, în sensuri contrare, cu rezonanța magnetică nucleară de spin. În figura 12.2.13 este schițat montajul experimental imaginat și realizat de către fizicianul indian Rabi. Acest montaj constă dintr-o sursă de microparticule S (atomi sau molecule) și din două perechi de piese polare $1 - 1'$ și $2 - 2'$, care realizează câmpuri magnetice orientate în același sens, dar cu gradienti de sensuri inverse. Între aceste perechi de poli $1 - 1'$ și $2 - 2'$ se găsesc piesele polare ale unui electromagnet $C - C'$, care creează un câmp magnetic omogen, de inducție B_c , peste care se suprapune un câmp magnetic b , de înaltă frecvență, orientat perpendicular pe direcția lui B_c . În fața polilor $C - C'$ se găsește o diafragmă, iar după

piesele polare 2 — 2', un detector D , care înregistrează fluxul de particule ce cad pe el. Sistemul este astfel conceput încît în lipsa cîmpului B , fasciculul de microparticule să cadă pe detectorul D .

Se variază lent, în prezența cîmpului b , inducția B , a cîmpului magnetic omogen și se înregistrează continuu intensitatea I a fasciculului de

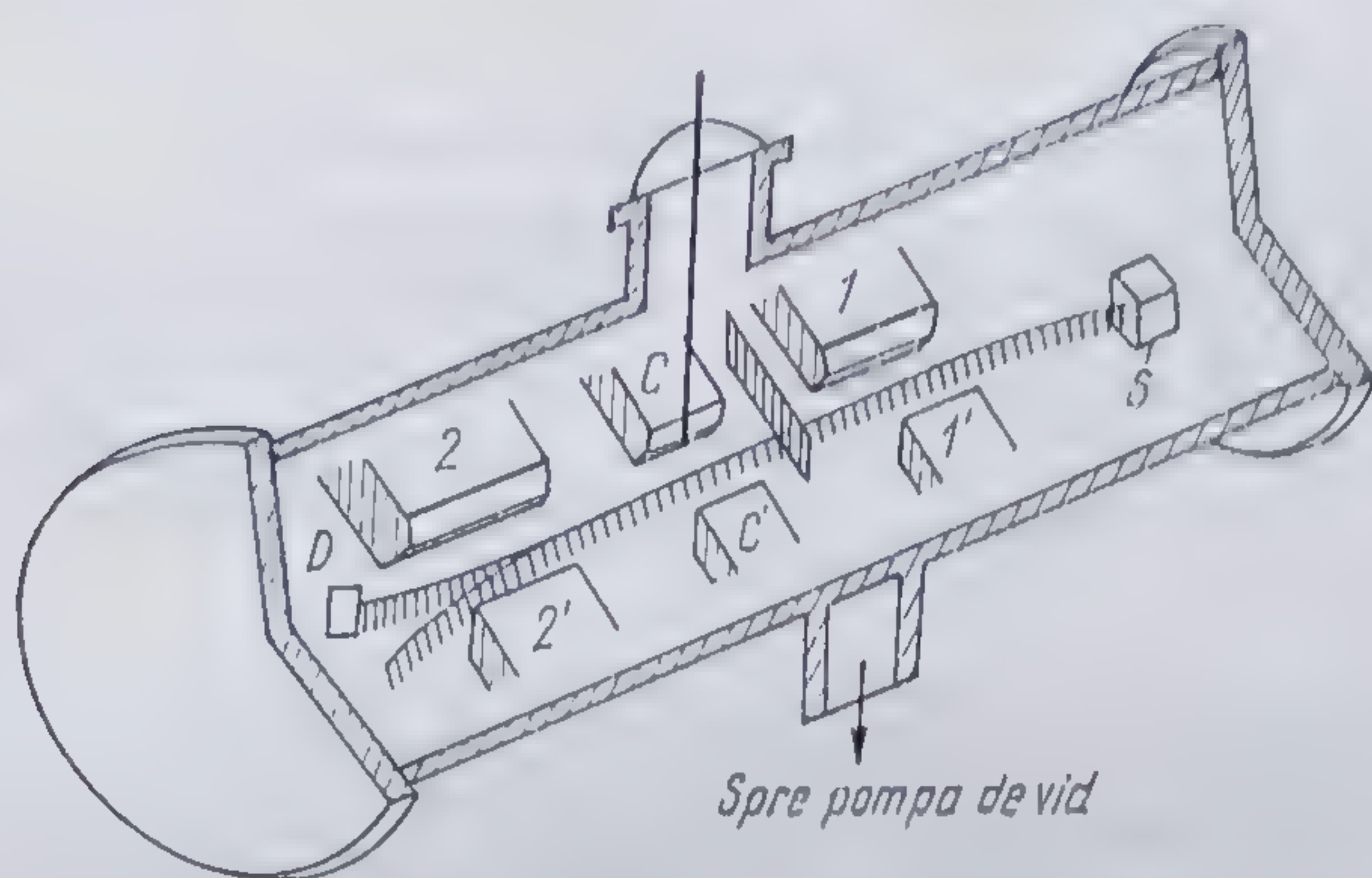


Fig. 12.2.13

microparticule ce cad pe detectorul D . Se constată că pentru o anumită frecvență ν , se obține un minim de rezonanță, de forma celui reprezentat în figura 12.2.14.

De remarcat că frecvența de rezonanță ν , corespunde unei absorbții de rezonanță magnetică nucleară de spin, care se induce prin tranziții

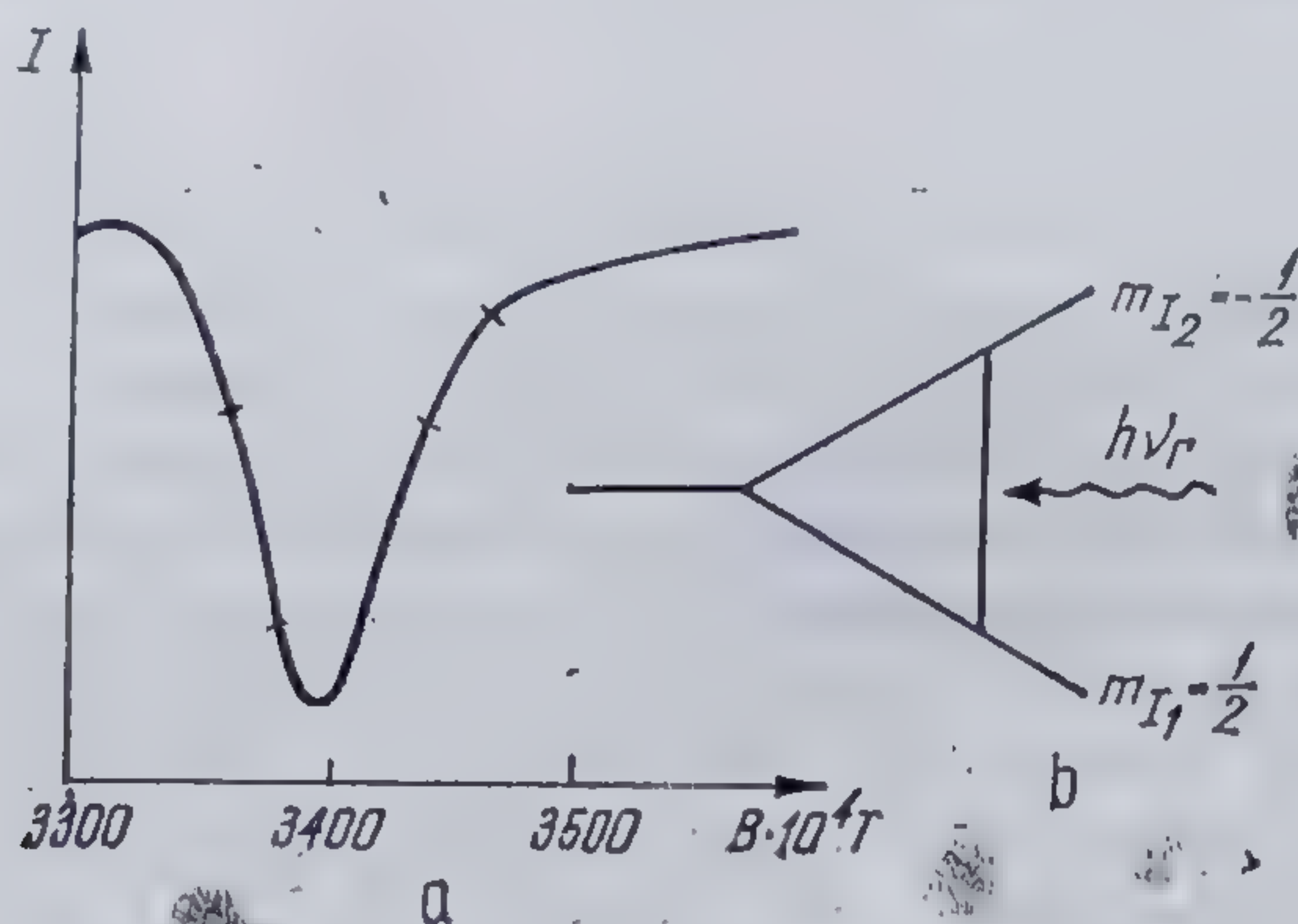


Fig. 12.2.14

magnetice ale spinilor nucleari, între subnivele Zeeman de spin nuclear (vezi fig. 12.2.14, b), atunci cînd

$$h\nu_r = E_{I_2} - E_{I_1} = g_I \mu_N B_0 \Delta m_I. \quad (12.2.35)$$

Într-adevăr, în urma unor astfel de absorbții rezonante de energie din partea câmpului \mathbf{b} , momentele magnetice nucleare $\langle \mu_I \rangle$ ale microparticulelor din fascicul își vor schimba brusc direcția față de inducția magnetică \mathbf{B}_0 (deoarece absorbția de energie magnetică conduce, în conformitate cu (12.2.31), la o creștere a unghiului de precesie $\theta = \pi \mathbf{J}, \mathbf{I}$) și deci își vor modifica și componenta $\langle \mu_I \rangle_z$. În consecință, se va modifica valoarea forței $F = \langle \mu_I \rangle_z \cdot (dB/dZ)_z$ cu care vor fi acționate aceste momente de către câmpul cu gradient nemul existent între piesele polare 2 — 2' și, ca atare, aceste particule nu vor mai putea ajunge pe detectorul D .

Din poziția picului de rezonanță se determină factorul Landé nuclear g_I , iar din numărul acestor picuri de absorbție se deduce numărul cuantic de spin nuclear I (vor apărea întotdeauna $2I + 1$ astfel de rezonanțe).

De exemplu, în cazul protonului, s-a obținut o singură curbă de rezonanță și deci $I = 1/2$. Pentru ^3Li s-a găsit $I = 3/2$ și $g_I = 2,1688 \pm \pm 0,001 \mu_N$, ceea ce înseamnă că $\langle \mu_I \rangle_{\text{Li}} = 3,2532 \mu_N$.

c) *Metoda rezonanței magnetice nucleare (RMN)* a fost descoperită de către E.M. Purcell, H. C. Torrey și A.V. Pound în anul 1946 și constă dintr-o absorbție rezonantă de energie de către un sistem de nuclee aflate sub acțiunea concomitentă a două câmpuri magnetice reciproc perpendiculare și anume, un câmp omogen \mathbf{B} , cu valori de ordinul unui tesla și un câmp de înaltă frecvență \mathbf{b} , de intensitate mult mai slabă și de frecvență $\nu, \simeq \simeq 10^7 \text{ Hz}$ [94].

Se constată ușor că acest fenomen este analog fenomenului de rezonanță electronică de spin în sisteme paramagnetice și constă în tranziții nucleare pe care le induce câmpul magnetic de înaltă frecvență între sub-nivelele Zeeman de spin nuclear. Dar, întrucât momentele magnetice nucleare sînt de aproximativ 2000 de ori mai mici, în valoare, decît momentele magnetice electronice de spin, frecvența de rezonanță a RMN va fi cu două-trei ordine de mărime mai scăzută decît frecvența de rezonanță RES, situîndu-se în gama de frecvențe a undelor radio. De aceea, în locul tehnicii de microunde, folosită în cazul RES, aici se va folosi o tehnică electronică obișnuită, bazată pe generarea oscilațiilor electromagnetice cu ajutorul circuitelor oscilante. Intervin însă dificultăți mai mari legate de nevoia de a asigura o foarte bună omogenitate pe spații largi ale inducției \mathbf{B} .

În figura 12.2.15 este prezentată schema unui spectrometru RMN. Proba P , în fază condensată, se găsește în eprubeta E , care este introdusă în bobina circuitului oscilant LC . Absorbția de rezonanță modifică factorul de calitate al acestei bobine, modificare ce se poate înregistra (după o prealabilă amplificare a semnalului rezultat din dezechilibrarea circuitului oscilant) pe un osciloscop sau se poate înregistra în mod continuu. De remarcat că și în acest caz se obțin picuri de absorbție, iar din poziția lor, respectiv din numărul acestor picuri de absorbție, se poate determina atît valoarea lui g_I , cît și numărul cuantic de spin nuclear I . Cîteva astfel de valori sînt trecute în tabelul următor, din care se remarcă faptul că momen-

tele magnetice nucleare de spin sînt nule pentru nucleele par-impare, excepție făcînd nucleele de $^{57}_{26}\text{Fe}$ și $^{61}_{28}\text{Ni}$, care, deși au un număr impar de neutroni, posedă momente magnetice nucleare de valori foarte mici.

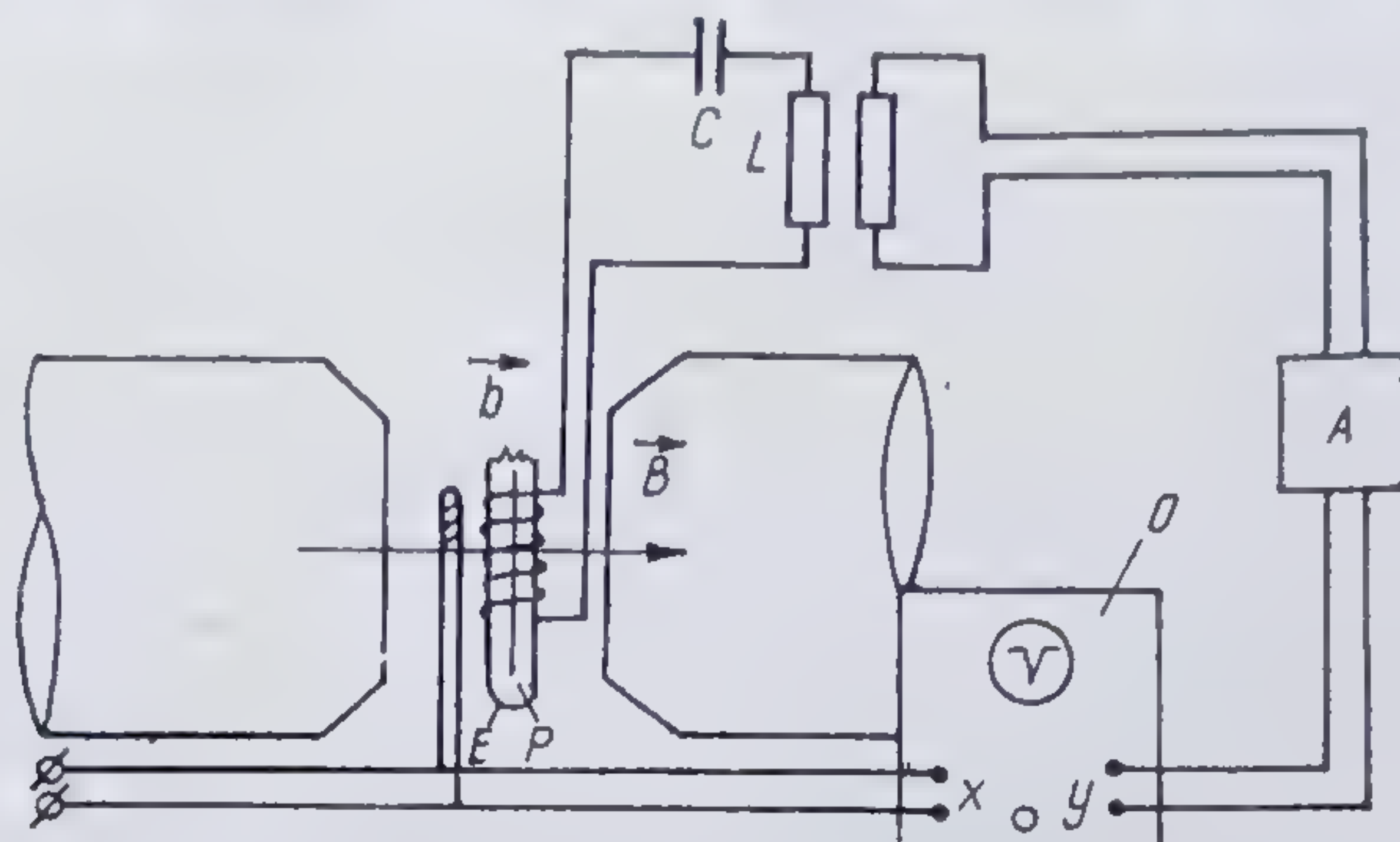


Fig. 12.2.15

Nucleul	A	Z	$N = A - Z$	g_I	I	$\frac{\langle \mu_I \rangle}{\mu_N} = g_I I$
Hidrogen (protonul)	1	1	0	5,58552	1/2	2,79276
Neutronul	1	0	1	-3,82596	1/2	-1,91298
Deuteriu	2	1	1	0,85738	1	0,85738
Litiu	6	3	3	0,82191	1	0,82191
Litiu	7	3	4	2,1688	3/2	3,2542
Bor	10	5	5	0,6002	3	1,8006
Azot	14	7	7	0,40357	1	0,40357
Flor	19	9	10	5,260	1/2	2,625
Vanadiu	50	23	27	0,5551	6	3,3413
Fier	57	26	31	0,105	1/2	0,05
Nichel	61	28	33	0,26	3/2	0,25
Indiu	113	41	72	1,22	9/2	5,490
Bariu	138	56	82	0	0	0
Hafniu	180	72	108	0	0	0

Rezultatele acestor măsurători au condus la concluzia că nucleele atomice se pot împărți, din punct de vedere al spinului nuclear I , în trei clase și anume:

- nucleele par-pare, pentru care $\langle \mu_r \rangle \simeq 0$;
- nucleele impar-pare, pentru care I este impar;
- nucleele impar-impare, pentru care I este par.

De remarcat și faptul că momentele magnetice nu sînt decît aproximativ aditive. În cazul deuteriului, de exemplu, intervine o diferență între momentul calculat și cel determinat, în valoare de

$$\langle \mu_I \rangle_D - (\langle \mu_p \rangle + \langle \mu_n \rangle) = [0,85739 - (2,79276 - 1,91298)]\mu_N = -0,022\mu_N.$$

Această neaditivitate absolută a momentelor nucleare a condus la concluzia că în cazul nucleelor, și chiar în cel al nucleonilor, intervin și *momente magnetice nucleare orbitale*, care la interacții slabe se cuplează cu cele de spin și această cuplare face ca $g_I \neq 2$, respectiv determină neaditivitatea momentelor magnetice ale nucleonilor din nucleu. Admițând existența și la nivel de nucleon a momentelor orbitale și de spin, atunci pentru momentele magnetice orbitale și de spin ale protonului și neutronului va trebui să folosim expresii de forma

$$\langle \mu_l \rangle_p = g_{lp} \mu_N \sqrt{l_p(l_p+1)}; \quad \langle \mu_s \rangle_p = g_{sp} \mu_N \sqrt{s_p(s_p+1)} \quad (12.2.36)$$

$$\langle \mu_l \rangle_n = g_{ln} \mu_N \sqrt{l_n(l_n+1)}; \quad \langle \mu_s \rangle_n = g_{sn} \mu_N \sqrt{s_n(s_n+1)}.$$

Dar întrucît, potrivit teoriei mezonice a forțelor nucleare, neutronul poate fi considerat ca o stare cuantică a nucleonului, compusă dintr-un proton și un mezon ${}^0_1\pi$ (${}^1_0n \rightarrow {}^1_1p + {}^0_1\pi$) se poate admite, așa cum a intuit Dirac, că momentul magnetic al neutronului are o valoare negativă tocmai datorită mișcării orbitale a mezonului ${}^0_1\pi$ în jurul protonului. În acest caz, trebuie să luăm

$$g_{lp} = 1; \quad g_{sp} = 2; \quad g_{ln} = g_{sn} = 0 \quad (12.2.37)$$

I și g_I fiind de astă dată concepute ca *număr cuantic nuclear intern*, respectiv ca *factor de desplicare spectroscopică nuclear*, în cadrul unor modele nucleare vectoriale, așa cum s-a procedat în cazul modelului vectorial al atomului (§ 10.3). Numai că o astfel de idee nu conduce la rezultate concordante cu experiența, așa cum a arătat pentru prima dată T. Schmidt [110]. Într-adevăr, prin reprezentarea grafică a momentelor nucleare $\langle \mu_I \rangle$, funcție de așa-numitele „numere Schmidt $I \cdot g_I$ ”, s-au obținut *diagramele lui Schmidt*, care pot fi explicate satisfăcător numai dacă se admite că :

$$g_{lp} = 1; \quad g_{sp} = 5,586; \quad g_{ln} = 0; \quad g_{sn} = -3,826. \quad (12.2.38)$$

Aceste rezultate pun în evidență prezența atât a momentelor cinetice orbitale la nivel nuclear, cît și a cuplajului spin-orbită.

După cum s-a arătat în secțiunile anterioare (§ 9.4), valoarea spinului determină apartenența microparticulelor la statistici cuantice, Fermi-Dirac sau Bose-Einstein. Pe cale experimentală s-a ajuns la concluzia certă că nucleonii (protonul și neutronul) au spinul $1/2$, ceea ce înseamnă că ei sînt *fermioni*. Atunci, nucleele par-impare (sau impar-pare) vor avea spinul nuclear impar, iar cele impar-impare vor avea spinul nuclear par. În cele ce urmează, pentru a nu interveni confuzii între spinul electronic notat cu S și cel nuclear, ultimul va fi notat cu I .

4. Forma, raza și nesfericitatea nucleului. Primele informații asupra dimensiunii nucleului atomic au fost obținute din studii de difuzie a particulelor α , care au condus la concluzia că această dimensiune a nucleului este de ordinul a $(3 \div 10)$ fm.

După ce s-a constatat că forțele nucleare posedă o rază scurtă de acțiune s-a admis că nucleele atomice trebuie să fie de formă sferică, la fel cum picăturile de lichid iau forma sferică, sub acțiunea forțelor de coeziune moleculară, care sînt de asemenea forțe cu rază scurtă de acți-

une (forțe de tip VanderWaals). Astăzi se știe că imaginea de nucleu sferic este în concordanță cu multe dintre faptele experimentale, obținute îndeosebi pentru nucleele ușoare. La nucleele mai grele apar și efecte de rotație, precum și efecte legate de prezența momentelor electrice de cvadrupol (nu apar însă efecte electrice de dipol), care pun în evidență o anumită abatere de la forma sferică. De aceea se poate vorbi atât de raza medie $\langle R \rangle$ a nucleului, cât și de o abatere $\delta R/R$ de la forma sferică.

Există mai multe metode experimentale care permit determinarea razei $\langle R \rangle$ a nucleului atomic, și anume:

- studiul dezintegrării β^+ a nucleelor atomice radioactive;
- determinarea deplasării izotopice a liniilor spectrale;
- studiul împrăstierii electronilor rapizi pe nuclee (difracții de neutroni);
- studiul structurii fine a radiațiilor X caracteristice emise de către nucleele grele;
- studiul mezoatomilor (atomi în care unul sau mai mulți electroni atomici au fost înlocuiți cu mezoni μ^- , cu masa de $207 m_e$);
- măsurători de împrăstiere coulombiană sau nucleară a particulelor α etc.

Toate aceste metode au condus la concluzia că volumul \mathcal{V}_N al unui nucleu atomic crește proporțional cu numărul de nucleoni A din nucleu și deci raza R a nucleului variază cu A , în conformitate cu relația

$$R = R_0 A^{1/3} \quad (12.2.39)$$

Ilustrăm această concluzie cu ajutorul studiului dezintegrării β^+ .

Se știe (vezi și § 12.5) că în acest caz intervin transformări de forma

$${}_1^1p \rightarrow {}_0^1n + {}_{+1}^0\beta + {}_0^0\nu \quad (12.2.40)$$

unde prin ${}_0^0\nu$ s-a notat *neutrino*, o particulă ce aparține clasei leptonilor, cu spin $1/2$ și masă proprie neglijabilă. Prin urmare, nucleele β^+ —active suferă tranziții între două stări izobare, în care Z scade cu o unitate

$${}_Z^AX \rightarrow {}_{Z-1}^AY + {}_{+1}^0\beta + {}_0^0\nu. \quad (12.2.41)$$

Se poate atunci admite că în acest tip de tranziții intervine doar variația energiei coulombiene a nucleului, dată de expresia

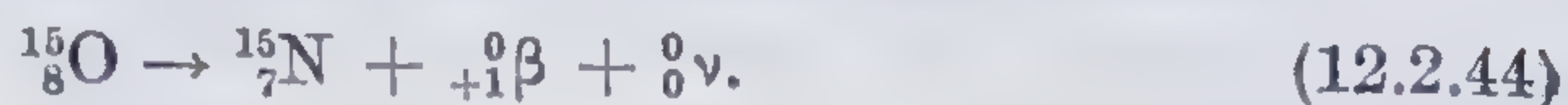
$$\Delta E_{coul} = \frac{3}{5} \frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 R} - \frac{3}{5} \frac{(Z-1)^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 R} = \frac{3}{5} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} (2Z-1). \quad (12.2.42)$$

nucleele fiind concepute ca sfere omogen încărcate cu sarcini electrice pozitive. Dar această variație ΔE_{coul} poate fi găsită și din bilanțul energetic al micro-particulelor care participă la respectiva tranziție, bilanț dat de expresia

$$\Delta E_{coul} = m_e c^2 + (E_{\beta^+})_{max}. \quad (12.2.43)$$

Aici, al doilea termen semnifică valoarea maximă a energiei spectrului β^+ , obținut în dezintegrarea β^+ , valoare ce se poate stabili experimental. De menționat că astfel de evaluări s-au efectuat pentru așa-numitele „nuclee oglindă”, în care A nu se schimbă în timpul tranziției, dar în

care protonii se interschimbă cu neutronii, cum este cazul tranziției



S-a găsit $\Delta E = \frac{3}{5} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R_0} A^{\frac{2}{3}}$, iar dacă se admite că energia coulombiană crește proporțional cu A și invers proporțional cu R , adică $\Delta E_{\text{coul}} = \frac{3}{5} \frac{e^2 A}{4\pi\epsilon_0 R}$, se obține rezultatul (12.2.39), în care

$$R_0 = (1,2 \div 1,3) \text{ fm}. \quad (12.2.45)$$

Din studiul mezoatomilor s-a obținut

$$R_0 = 1,1 \text{ fm}. \quad (12.2.46)$$

Rezultă astfel că raza de acțiune a forțelor nucleare este de ordinul unui fermi.

Desigur că pe baza metodelor mai sus menționate se pot obține informații numai asupra distribuției protonilor din nucleu, deci valorile lui $\langle R \rangle$ prezentate mai sus se referă la o așa zisă „rază protonică” medie a nucleului, definită prin expresia

$$\langle R_p^2 \rangle = \frac{\int \rho(r) r^2 dV}{\int \rho(r) dV} \quad (12.2.47)$$

$\rho(r)$ fiind densitatea volumică a protonilor din nucleu. Prin studii de difracție a neutronilor pe nuclee s-au obținut valori pentru o așa zisă „rază medie neutronică” $\langle R_n \rangle$ a nucleului, definită pe baza secțiunii eficace de difuzie

$$\sigma = \pi \langle R_n^2 \rangle. \quad (12.2.48)$$

Dar și măsurătorile de acest fel pun în evidență o dependență a razei nucleare de A tot de forma (12.2.39) și dau valori $R_0 \approx 10^{-15} \text{ m}$. Studiile mai recente de împrăștiere a nucleonilor de mare energie ($E > 1 \text{ GeV}$) pe nuclee au condus la concluzia că densitatea masică medie este de ordinul

$$\rho_N = 2,7 \cdot 10^{17} \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \quad (12.2.49)$$

ceea ce înseamnă că raza de acțiune a forțelor nucleare, calculată din expresia

$$\rho_N = \frac{m_p}{\frac{4\pi}{3} R_0^3}, \quad (12.2.50)$$

are valoarea $R_0 = 2,5 \text{ fm}$.

Tot pe cale experimentală a fost descoperită și nesfericitatea, $\delta R/R$, a nucleelor atomice. Mai sus au fost amintite două dintre aceste fapte experimentale și anume prezența structurii de rotație a spectrelor radiațiilor (α , β și γ) emise de către nucleu și prezența interacțiilor de tip electric cvadrupolar, care se evidențiază în experiențe de RMN.

Structura de rotație a spectrelor radiațiilor nucleare este, firește, legată direct de structura de rotație a nivelelor energetice ale nucleonilor din nucleu, respectiv de prezența unor momente cinetice orbitale la nivel nuclear. Ea relevă o structură dinamică a nucleului, în care nucleonii execută pe lângă mișcarea de spin și o mișcare orbitală, asemănătoare mișcărilor orbitale ale electronilor atomici. Dar momente cinetice $\langle L_j \rangle$ orbitale diferite de zero pot interveni numai în cazul distribuțiilor nesferice. Prin urmare, nucleele pentru care $\langle L_j \rangle \neq 0$ vor prezenta o anumită nesfericitate $\delta R/R \neq 0$.

5. Momentul de cvadrupol al nucleului este o mărime legată direct de nesfericitatea nucleului și intervine în descrierea interacției nucleului cu un câmp electric neomogen. Momentul de cvadrupol se definește prin expresia

$$Q = -\frac{1}{e} \int \rho(r)(3z^2 - r^2) d\mathcal{V} \quad (12.2.51)$$

axa oz fiind aleasă pe direcția după care Q prezintă o valoare extremă (maximă sau minimă). Admițând existența unei distribuții elipsoidale de rotație a celor Z sarcini pozitive ale protonilor din nucleu, axa Oz —fiind aleasă drept axă de rotație a respectivei distribuții, din (12.2.51) se obține

$$Q = \frac{2}{5} Z(a^2 - b^2) \quad (12.2.52)$$

unde a și b sînt semiaxele (mari și mici) ale elipsoidului. Se observă că, pentru $Q > 0$, distribuția protonilor este de forma unui elipsoid alungit, iar pentru $Q < 0$, de forma unui elipsoid turtit.

Momentul de cvadrupol are dimensiunea unei arii și se exprimă în barni, ca și secțiunile eficace

$$1 \text{ barn} = 10^{-28} \text{ m}^2. \quad (12.2.53)$$

Din valorile trecute în tabelul de mai jos se vede că la nucleele ușoare

Nucleu	^2_1H	$^{14}_7\text{N}$	$^{64}_{31}\text{Ga}$	$^{63}_{29}\text{Cu}$	$^{93}_{41}\text{Nb}$	$^{175}_{71}\text{Lu}$	$^{179}_{73}\text{Lu}$	$^{233}_{92}\text{U}$
Q (barni)	0,002	0,007	0,02	0,16	-0,3	5,9	3	3,4

$Q > 0$, iar la cele grele, Q poate avea atât valori pozitive cît și negative.

Se poate arăta [110] că momentul de cvadrupol Q este legat de nesfericitatea $\delta R/R$ a nucleului prin relația

$$Q = \frac{4ZR_0^2}{5} \cdot \frac{\delta R}{R} \quad (12.2.54)$$

De notat, de asemenea, că momentul de cvadrupol Q , prezentat mai sus, a fost definit în raport cu centrul de inerție al distribuției protonilor din nucleu. Dacă se trece la sistemul de referință inerțial al laboratorului, atunci se va putea defini un moment de cvadrupol Q_L , care va îngloba și efectele de rotație ale nucleului. Se poate arăta [110] că în acest caz

$$Q_L = \frac{J(2J - 1)}{(J + 1)(2J + 3)} \cdot Q. \quad (12.2.55)$$

J fiind numărul cuantic de rotație al nucleului.

6. Comportarea statistică a nucleelor. În §9.4 s-a arătat că una dintre caracteristicile cuantice fundamentale ale microparticulelor este reprezentată de apartenența lor la statistica Fermi-Dirac sau la statistica Bose-Einstein. Această apartenență este determinată de valoarea spinului, particulele cu spin semiîntreg (respectiv fermionii), fiind supuse principiului de excluziune al lui Pauli, se comportă statistic conform legii de distribuție Fermi-Dirac (9.4.29), iar bosonii, particule cu spin întreg se comportă conform legii de distribuție Bose-Einstein (9.4.30).

Dar principiul de excluziune este valabil și la nivel nuclear, pentru sistemele de nucleoni al căror spin total I este semiîntreg. Nucleonii înșiși sînt fermioni, întrucît ei au spinul $I = 1/2$. Rezultă, deci că nucleeele par-pare ($Z = \text{par}$, $A - Z = \text{par}$) vor avea un comportament statistic de tip bosonic, iar cele par-impare, respectiv impar-pare, un comportament de tip fermionic. De notat că aceste fapte sînt în concordanță cu datele experimentale, una dintre dovezile cele mai concludente fiind constituită de rezolvarea celebrei „catastrofe a azotului”, care a demonstrat nejustețea ipotezei cu privire la structura protono-electronică a nucleelor atomice. Potrivit acestei ipoteze, nucleul atomic ar fi trebuit să conțină A protoni și $A - Z$ electroni. Prin urmare, în cazul izotopului ${}^{14}_7\text{N}$, comportamentul statistic ar fi trebuit să fie de tip bosonic (existînd 14 protoni, 7 electroni atomici și 7 electroni nucleari, deci în total 28 particule cu spin $1/2$). Or, comportamentul statistic al ${}^{14}_7\text{N}$ este de tip fermionic, în concordanță cu structura protono-neutronică a nucleului (7 protoni, 7 neutroni și 7 electroni atomici, un total de 21 particule cu spin $1/2$).

7. Paritatea și spinul izotopic (izospinul). Paritatea este o altă caracteristică specific cuantică a microparticulelor, care, ca și apartenența lor la o anumită statistică, nu se schimbă în majoritatea tranzițiilor nucleare*. Paritatea exprimă un anumit tip de simetrie și anume simetria

* Excepție fac tranzițiile determinate de interacțiile slabe (vezi §12.5), care se fac cu violarea principiului conservării parității.

prin oglindire a sistemelor cuantice. Ea se reprezintă printr-un operator de inversie \hat{I}_s , care, acționînd asupra funcției de undă (vezi și §10.2), inversează semnele coordonatelor de poziție ale microparticulelor, adică

$$\hat{I}_s \psi(r_1, r_2, \dots, r_n) = \psi(-r_1, -r_2, \dots, -r_n). \quad (12.2.56)$$

Desigur că atunci

$$\hat{I}_s^2 \psi(r_1, r_2, \dots, r_n) = \hat{I} \psi(-r_1, -r_2, \dots, r_n) = \psi(r_1, r_2, \dots, r_n) \quad (12.2.57)$$

și deci \hat{I}_s va poseda numai două valori proprii, întrucît

$$\langle I_s^2 \rangle = 1 \quad \text{și deci} \quad \langle I_s \rangle = \pm 1. \quad (12.2.58)$$

Funcțiile pentru care

$$\hat{I}_s \psi(r_1, r_2, \dots, r_n) = \langle I_s \rangle \psi(r_1, r_2, \dots, r_n) = (+1) \psi(r_1, \dots, r_n) \quad (12.2.59)$$

se numesc *funcții pare* (au paritatea $+1$), iar cele pentru care

$$\hat{I}_s \psi(r_1, \dots, r_n) = \langle I_s \rangle \psi(r_1, \dots, r_n) = (-1) \psi(r_1, \dots, r_n) \quad (12.2.60)$$

se numesc *funcții impare* (au paritatea -1).

De remarcă că se poate vorbi atît de o paritate exterioară, cît și de una interioară. Prima este determinată de mișcarea nucleului față de un sistem de referință inerțial nepropriu, iar a doua, de mișcarea în raport cu sistemul inerțial propriu al nucleului. Dacă prima mișcare se descrie printr-o funcție de undă de forma

$$\psi(r, \theta_c, \varphi_c) = R(r) Y(\theta_c, \varphi_c) \quad (12.2.61)$$

în care θ_c și φ_c sînt unghiurile polar și azimutal ale centrului de inerție al nucleului (12.2.4), iar r este distanța acestui centru față de originea axelor de coordonate, atunci, întrucît

$$\hat{I}_{s \text{ ext}} \psi(r, \theta_c, \varphi_c) = R(r) \cdot Y(\pi - \theta_c, \varphi_c + \pi) \quad (12.2.62)$$

funcția de undă sferică $Y(\theta, \varphi)$, fiind determinată de numerele cuantice orbital l și magnetic orbital m_l , conform expresiilor (10.2.48), (10.2.51) și (10.2.53), rezultă

$$Y_l^{m_l}(\pi - \theta_c, \pi + \varphi_c) = (-1)^l Y_l^{m_l}(\theta_c, \varphi_c). \quad (12.2.63)$$

Prin urmare

$$\hat{I}_{s \text{ ext}} \psi(r, \theta, \varphi) = (-1)^l \psi(r, \theta, \varphi) \quad (12.2.64)$$

iar paritatea totală va fi dată de produsul

$$\langle I_s \rangle = \langle I_s \rangle_{\text{ext}} \langle I_s \rangle_{\text{int}} = (-1)^l \langle I_s \rangle_{\text{int}} \quad (12.2.65)$$

Atunci în cazul unui sistem format din doi nucleoni liberi, întrucît

$$\psi(r_1, r_2) = \psi_1(r_1) \cdot \psi_2(r_2) \quad (12.2.66)$$

se obține

$$\langle I_s \rangle = (-1)^{l_1+l_2} \langle I_s \rangle_{int}^{(1)} \cdot \langle I_s \rangle_{int}^{(2)}. \quad (12.2.67)$$

De notat că funcția de undă $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ va trebui să fie tot o funcție antisimetrică, deoarece nucleonii, cu spinul $I = 1/2$, fac parte din clasa fermionilor. Aceasta înseamnă că funcția de undă $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ trebuie să aibă o astfel de structură încât să-și schimbe semnul atunci când nucleonii își interschimbă între ei pozițiile, adică

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1). \quad (12.2.68)$$

Dar, spre deosebire de electroni, nucleonii se pot găsi în două stări distincte și anume: *starea de proton* și *starea de neutron*, diferite între ele prin sarcina electrică ($q_p = +e$; $q_n = 0$). Cu toate că interacțiunile nucleare nu depind decât foarte slab de sarcina electrică, se poate pune problema dacă la interschimbarea poziției \mathbf{r}_p a unui proton, cu poziția \mathbf{r}_n a unui neutron, funcția de undă $\psi(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_n)$ trebuie sau nu să-și schimbe semnul, la fel ca în cazul când se interschimbă pozițiile a doi protoni, descriși prin funcția de undă $\psi(\mathbf{r}_{p_1}, \mathbf{r}_{p_2})$, respectiv a doi neutroni descriși prin $\psi(\mathbf{r}_{n_1}, \mathbf{r}_{n_2})$.

În rezolvarea acestei probleme s-a plecat de la faptul că nucleonii (protonii și neutronii) aparțin unei clase de particule identice, iar prezența sau absența sarcinii electrice determină, prin intermediul interacțiilor de tip coulombian, doar o mică influență asupra stărilor cuantice. Dar funcția de undă $\psi(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_n)$ trebuie să evidențieze și această mică influență. De aceea, spre deosebire de funcțiile $\psi(\mathbf{r}_{p_1}, \mathbf{r}_{p_2})$ și $\psi(\mathbf{r}_{n_1}, \mathbf{r}_{n_2})$, care sînt funcții de undă antisimetrice de tipul (12.2.68), funcția de undă $\psi(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_n)$ va fi doar o funcție „aproape antisimetrică”. Pentru a exprima aceste proprietăți ale funcțiilor de undă care descriu stările cuantice ale nucleonilor (precum și ale altor particule elementare, vezi §12.10) s-a introdus noțiunea de *spin izotopic* sau *izospin*.

Izospinul T este un număr cuantic, care întocmai ca și spinul nuclear I , posedă o componentă T_3 , existînd deci și o *multiplicitate de izospin*, dată de $2T + 1$. Pentru nucleoni, $T = 1/2$ și deci multiplicitatea de izospin este $2 \cdot 1/2 + 1 = 2$, ceea ce înseamnă că există numai doi nucleoni: protonul, pentru care $T_3 = 1/2$ și neutronul, pentru care $T_3 = -1/2$.

În general, componenta T_3 a spinului izotopic este dată de relația

$$T_3 = \frac{1}{2}(Z - N). \quad (12.2.69)$$

Formalismul izospinului este util în studiul proceselor nucleare, deoarece s-a constatat că izospinul se conservă în aceste procese. S-au putut astfel formula cîteva reguli de selecție pentru tranzițiile nucleare. În același timp, cu ajutorul izospinului pot fi indexate funcțiile de undă, în așa fel încît să se obțină mica distincție dintre stările de proton și de neutron ale nucleonului. În acest scop se folosește același procedeu ca cel

din cazul spinului electronic (vezi (8.11.28)) și anume se ia o funcție de undă de forma

$$\psi(\mathbf{r}, I, T) = \psi(\mathbf{r}) \cdot \psi(m_I) \cdot \psi(T_3) \quad (12.2.70)$$

în care componenta $\psi(T_3)$ descrie tocmai multiplicitatea de izospin a stărilor cuantice respective. De exemplu, în cazul unui sistem format din doi nucleoni, cu $T = 1/2$, se vor putea realiza următoarele trei stări distincte: $T = 0$; $T = +1$ și $T = -1$. Se observă că starea cu $T = 0$ are o multiplicitate de izospin $2T_3 + 1 = 1$, fiind deci o *stare singlet*, iar starea cu $T = 1$ are o multiplicitate de izospin $2T_3 + 1 = 3$, fiind o *stare triplet*.

Stări de triplet îi corespund formațiile:

$$\begin{array}{lll} \text{a) } I = 0; T = 1 & \text{b) } I = 1; T = 0 & \text{c) } I = 0; T = 1 \\ T_3 = -1 & T_3 = 0 & T_3 = 1 \quad (12.2.71) \\ {}^2_0n & {}^2_1H & {}^2_1p. \end{array}$$

De remarcat că spinul nuclear I este nul în starea de triplet, dacă $T = 1$. El poate avea însă și valoarea $I = 1$, atunci când $T = 0$. Deci sistemul $n - p$ (respectiv deuteronul) se poate găsi în două stări diferite, starea cu $T = 1$ fiind echivalentă stărilor 2_0n respectiv 2_1p . Deci sistemul $p - n$ are spinul izotopic nul în starea de triplet și $T = 1$ în starea de singlet. Această concluzie derivă din faptul că funcția de undă a doi nucleoni trebuie să fie antisimetrică față de permutarea celor două particule, deci trebuie să schimbe semnul în urma unei astfel de operații de permutare, în conformitate cu (12.2.68). Dar permutarea celor doi nucleoni atrage după sine permutarea tuturor variabilelor cuantice care descriu respectiva stare cuantică a nucleonilor, în conformitate cu (12.2.70).

Mai sus s-a văzut că paritatea componentei spațiale $\psi(\mathbf{r})$ este dată de numărul cuantic orbital l , paritatea componentei de spin $\psi(m_I)$ este dată de spinul nuclear I și este $(+1)$, dacă $I = 1$ și (-1) dacă $I = 0$. Înseamnă că cerința ca funcția de undă $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ să fie antisimetrică pentru doi nucleoni aflați în stările $S, D, \dots (l = 0, 2, \dots)$ este ca spinul izotopic să fie nul ($T = 0$, dacă spinul nuclear este $I = 1$) și să aibă valoarea $T = 1$ (dacă $I = 0$).

Paritatea funcției de undă în raport cu spinul izotopic, respectiv cerința ca $\psi(-T_3) = \pm \psi(T_3)$, este legată direct de diferența dintre energiile sistemelor nucleare în care toți neutronii sînt înlocuiți cu protoni, iar protonii cu neutroni, adică din sistemele de tip „oglină”. Această diferență este dată de expresia

$$\Delta E = 1,45ZA^{-1/3} [\text{MeV}]. \quad (12.2.72)$$

Fiind vorba de o diferență de energie coulombiană rezultă, din cele expuse, că toate nucleele care posedă același T vor aparține aceleiași multiplicități de izospin $2T_3 + 1$ și vor posedă nivele energetice nucleare

analoge. De notat, de asemenea, că spinul izotopic T este o variabilă cuantică specifică numai interacțiilor tari și că expresia $\langle L_T \rangle = \hbar \sqrt{T(T+1)}$ nu are nici o semnificație fizică intrinsecă.

§ 12.3. FORȚE NUCLEARE

Caracteristicile nucleului atomic, prezentate în paragraful precedent, au scos în evidență complexitatea deosebită a interacțiilor ce se nasc între nucleonii din cadrul nucleului. Aceste interacții, denumite *forțe nucleare*, determină atât marea stabilitate a nucleelor atomice, cât și structura lor, tipul tranzițiilor nucleare și a mecanismele de desfășurare a reacțiilor nucleare. De aceea, cunoașterea forțelor nucleare este de mare însemnătate pentru studiul nucleului atomic.

Multe dintre caracteristicile forțelor nucleare au fost obținute, așa cum s-a văzut mai sus, pe cale experimentală. Este vorba de raza lor scurtă de acțiune, caracterul de saturație, caracterul de forțe necentrale, intensitatea lor ridicată etc. Dar pentru a construi o teorie cuantică a nucleului, chiar și a celui mai simplu, format numai din doi nucleoni, cum este deuteriul ${}^2_1\text{d}$, teorie bazată pe o ecuație de tip Schrödinger (8.6.1), va fi necesar să cunoaștem dependența acestor forțe de distanța r dintre nucleonii aflați în interacție, respectiv să cunoaștem dependența de distanța r a energiei lor de interacție $V(r)$.

a) *Teoria cuantică a deuteriului.* O primă încercare de a construi o astfel de teorie este făcută de către W. Heisenberg, care în anul 1932 elaborează, pe baza unui model teoretic simplificat, o *teorie cuantică a deuteriului*.

În cadrul modelului folosit de Heisenberg se admite că interacția dintre cei doi nucleoni ai deuteriului (un proton și un neutron) poate fi modelată printr-o groapă de potențial rectangulară (fig. 12.3.1), de lărgime egală cu de două ori raza de acțiune R_0 a forțelor nucleare și de adâncime egală cu V_0 . Atunci, pentru o simetrie radială, ecuația atemporală Schrödinger se va scrie sub forma

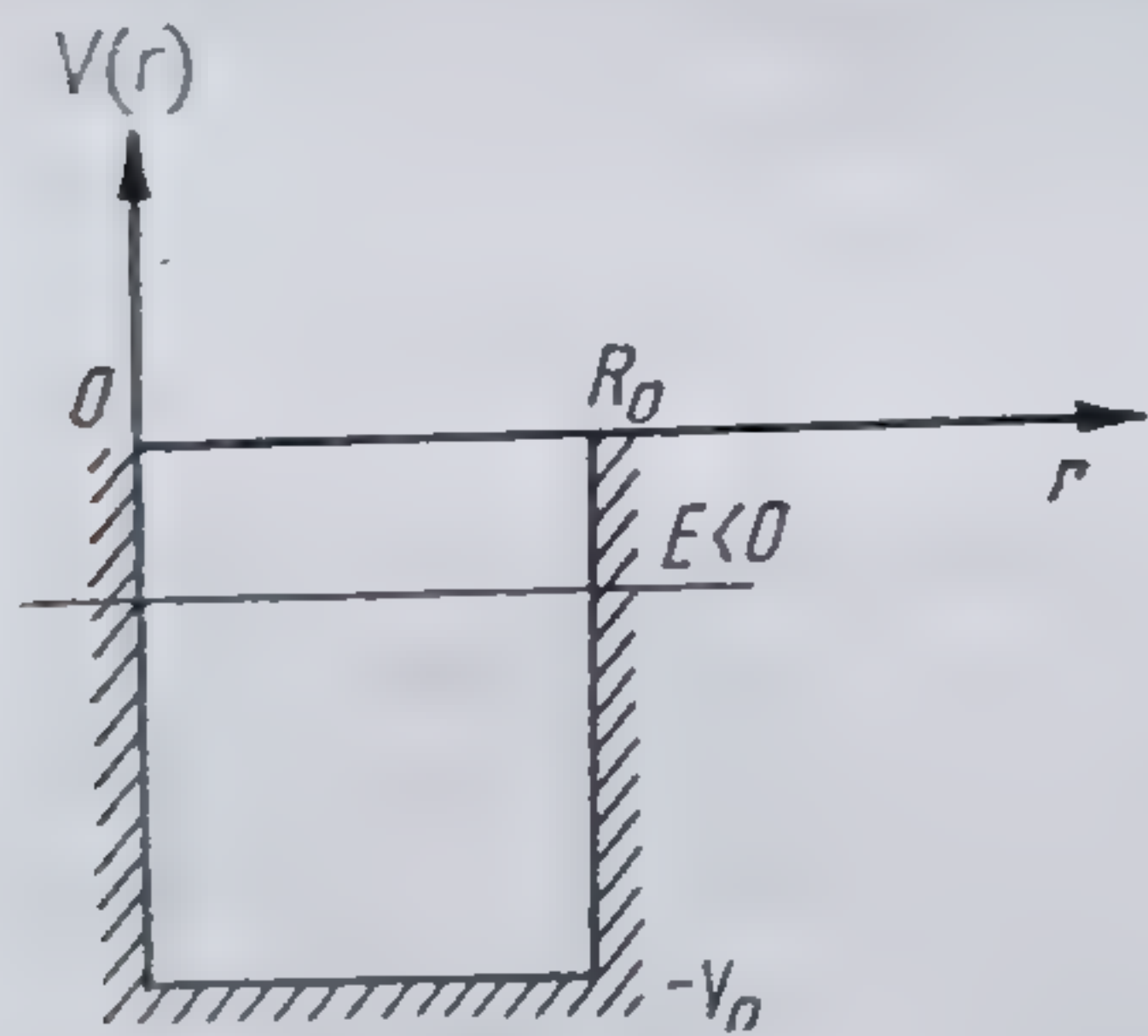


Fig. 12.3.1

$$\Delta_r \psi(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) \psi(r) = 0 \quad (12.3.1)$$

în care prin μ s-a notat masa redusă a celor doi nucleoni și anume

$$\mu = \frac{m_p \cdot m_n}{m_p + m_n} \approx \frac{m_p}{2}. \quad (12.3.2)$$

Cu o transformare de forma $\chi(r) = r\psi(r)$, ecuația (12.3.1) se reduce la

$$\frac{d^2\chi(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V(r))\chi(r) = 0 : \quad (12.3.3)$$

De remarcat că deoarece în interiorul gropii de potențial, $V(r) = -V_0$ și $E < 0$, iar în exteriorul gropii, $V(r) = 0$ și $E < 0$, ecuația de undă (12.3.3) va lua, pentru cele două regiuni, următoarele forme

$$\frac{d^2\chi_{int}(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0 - E)\chi_{int}(r) = 0 \quad (12.3.4)$$

și

$$\frac{d^2\chi_{ext}(r)}{dr^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2}E\chi_{ext}(r) = 0 \quad (12.3.5)$$

care cu notații de forma

$$k_1^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0 - E); \quad k_2^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2} \quad (12.3.6)$$

admit soluții de forma

$$\chi_{int}(r) = A \sin k_1 r; \quad \chi_{ext}(r) = B e^{-k_2 r}. \quad (12.3.7)$$

Dar în conformitate cu condițiile standard (8.5.26), funcția $\chi(r)$ trebuie să fie continuă pe peretele gropii de potențial. Vom scrie această condiție de continuitate sub forma

$$\frac{d}{dr}[\ln \chi_{int}(r)]_{r=R_0} \equiv \frac{d}{dr}[\ln \chi_{ext}(r)]_{r=R_0}. \quad (12.3.8)$$

din care rezultă

$$k_1 \operatorname{ctg} k_1 R_0 = -k_2 \Rightarrow \operatorname{ctg} k_1 R_0 = -\sqrt{\frac{E}{V_0 - E}} \quad (12.3.9)$$

Dacă se admite că $V_0 \gg E$, atunci $\operatorname{ctg} k_1 R_0 \simeq 0$, ceea ce înseamnă $k_1 R_0 \approx \pi/2$ și deci

$$V_0 \geq \frac{\pi \hbar^2}{8\mu R_0^2}. \quad (12.3.10)$$

Luând, în această expresie, pentru raza de acțiune a forțelor nucleare valoarea $R_0 = 1,5$ fm se obține pentru V_0 valoarea de aproximativ 50 MeV, care depășește cu mult valoarea energiei de legătură W_{leg} a deuterionului ($W_{leg} = 2,12$ MeV). Se desprinde astfel concluzia că nivelul energetic E , corespunzător stării fundamentale a deuterionului, este situat aproape la marginea superioară a gropii de potențial (fig. 12.3.1.). Acest

rezultat justifică atât stabilitatea scăzută, cât și inexistența la deuteron a unor stări excitate, întrucât acestea ar corespunde la valori $E > 0$, care conduc la „disocierea” deuterionului.

Trebuie remarcat și faptul că la deuteron starea fundamentală este o stare nedegenerată de triplet ($I = 1$). Prezența acestei stări de triplet ne arată că forțele nucleare depind de orientarea reciprocă a spinilor nucleonilor. Ele au o intensitate mai mare în cazul când respectivii spini sînt orientați paralel, decît în cazul când aceștia sînt orientați antiparalel. O astfel de concluzie a fost ulterior verificată și direct, prin experiențe de polarizare a fasciculelor de protoni pe ținte polarizate magnetic. Pe de altă parte, prezența la deuteron a unui moment de cvadrupol diferit de zero ($Q = 0,0023$ barni) pune în evidență *caracterul necentral al forțelor nucleare*. Despre acest caracter de forțe necentrale se obțin informații și din măsurătorile de momente magnetice nucleare, care așa cum se constată din tabelul de la p. 299, conduc la concluzia că

$$\mu_d \neq \mu_p + \mu_n. \quad (12.3.11)$$

Se știe însă că întrucît $T = 1$, starea fundamentală a deuterionului este o stare de tip S (cu moment orbital zero) și deci momentul magnetic al deuterionului este un moment magnetic de spin*. În aceste condiții, inegalitatea (12.3.11) va trebui să fie pusă pe seama neparalelismului spinilor celor doi nucleoni din nucleul deuterionului, neparalelism care va determina și caracterul necentral al forțelor nucleare.

Cu toate că prima teorie cuantică a deuterionului a înregistrat succese modeste, ea a avut meritul de a stimula preocupări pentru deslășirea naturii forțelor nucleare. De mare importanță s-a dovedit, în acest sens, ideea lui E. Tamm, formulată în anul 1934, potrivit căreia forțele nucleare, cu rază scurtă de acțiune, ar putea să fie puse pe seama unui schimb continuu de microparticule, *cu masă de repaus nenulă* între nucleoni, întocmai cum forțele electromagnetice sînt realizate de un schimb de fotoni între sarcinile electrice aflate în interacțiune. Așa cum se va vedea mai jos, această idee se regăsește în teoria mezonică a forțelor nucleare, constituind de fapt fundamentul ei.

b) *Teoria mezonică a forțelor nucleare* a fost creată în anul 1935 de către fizicianul japonez Hideki Yukawa, fiind o teorie cuantică relativistă, bazată pe un hamiltonian construit cu ajutorul relației relativiste

$$E^2 = p^2 c^2 + m_\pi^2 c^4. \quad (12.3.12)$$

În concepția lui Yukawa, o astfel de expresie poate exprima energia unui câmp de particule cu masă proprie $m_\pi \neq 0$, care realizează, prin schimb între nucleoni, forțele de interacție din nucleu.

* Concluzia că starea fundamentală a deuterionului este o stare S (sau D) este susținută și de faptul că paritatea funcției de undă în această stare este $(+1)$, deci $(-1)^l = +1$, ceea ce înseamnă că $l = 0$ sau 2 .

Expresia (12.3.12) poate fi ușor transpusă într-un limbaj cuantic prin introducerea operatorilor (vezi (8.5.15) și (8.6.8))

$$E \rightarrow \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}; \quad p^2 \rightarrow \hat{p}^2 = (-i\hbar \nabla)^2 = -\hbar^2 \Delta. \quad (12.3.13)$$

Dacă se admite că câmpul forțelor nucleare este descriptibil printr-o funcție scalară $f(\mathbf{r}, t)$, atunci din (12.3.12), cu (12.3.13) se obține ecuația

$$\Delta f - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = \frac{m_\pi^2 c^2}{\hbar^2} f. \quad (12.3.14)$$

Această ecuație se reduce pentru un câmp staționar cu simetrie radială, în care caz $f(\mathbf{r}, t) = f(r)$, la forma

$$\Delta_r f(r) - k_0^2 f(r) = 0 \quad (12.3.15)$$

unde s-a folosit notația

$$k_0 = \frac{m_\pi c}{\hbar}. \quad (12.3.16)$$

De reținut că o ecuație de undă de tipul (12.3.15) este cunoscută sub denumirea de *ecuația lui Klein și Gordon*, deoarece ea a fost obținută încă prin anii 1927—1928 de către cei doi fizicieni în tentativa lor de a construi o teorie cuantică relativistă a atomului (vezi § 8.11).

Soluția ecuației (12.3.15) se obține ușor, dacă se face schimbarea de funcție $\chi(r) = r f(r)$, care conduce la ecuația

$$\frac{d^2 \chi(r)}{dr^2} - k_0^2 \chi(r) = 0. \quad (12.3.17)$$

Rezultă o funcție de forma

$$f(r) = A \frac{e^{-k_0 r}}{r} \quad (12.3.18)$$

care este rapid descrescătoare cu creșterea lui r . Dacă prin analogie cu ecuațiile Poisson ale câmpului electromagnetic (vezi relațiile (6.5.16) și (6.4.17)) se admite că ecuația (12.3.15) descrie un câmp nuclear scalar fără surse, atunci în prezența unor astfel de surse, de sarcină g , în locul ecuației (12.3.15) va trebui să avem în vedere ecuația

$$(\Delta_r - k_0^2) f(r) = g. \quad (12.3.19)$$

Soluția acestei ecuații este de forma

$$f(r) = \frac{g}{r} e^{-k_0 r} \quad (12.3.20)$$

și deci pentru energia de interacție $V(r)$ dintre doi nucleoni se va obține expresia

$$V(r) = -\frac{g^2}{r} e^{-k_0 r}, \quad (12.3.21)$$

O funcție potențială de tipul (12.3.21), numită adesea *funcție potențială de tip Yukawa*, pune în evidență existența razei scurte de acțiune a forțelor nucleare și caracterul lor de saturație. Într-adevăr, dacă se ia $k_0 r > 1$, atunci se vede că $V(r) \simeq 0$, astfel că dacă se consideră

$$k_0 R_0 = 1 \quad (12.3.22)$$

(R_0 fiind raza de acțiune a forțelor nucleare, distanță la care $V(R_0) \simeq 0$), atunci, cu (12.3.16), din (12.3.22) rezultă că particula care realizează legătura dintre nucleoni are o masă de repaus m_π de valoarea

$$m_\pi = \frac{h}{R_0 c} \simeq 270 m_e. \quad (12.3.23)$$

Yukawa denumește *mezon* o astfel de particulă, întrucât ea are masă proprie cuprinsă între masa electronului m_e și a protonului m_p ($m_p = 1836,15 m_e$). De aceea, întreaga lui teorie a primit denumirea de *teorie mezonică a forțelor nucleare*. Ulterior, acestor particule li s-a dat numele de *mezoni* π , deoarece în anul 1936, Anderson a descoperit prezența unor mezoni în radiația cosmică, așa-numiții *mezoni* μ^\pm , cu masa de repaus $m_\mu = 207 m_e$, dar care s-au dovedit a manifesta interacțiuni extrem de slabe cu nucleonii. Abia în anul 1947 Ochiaiini și Powel descoperă, tot în radiația cosmică, trei tipuri de mezoni π , doi dintre ei fiind purtători de sarcină electrică pozitivă sau negativă, iar unul fiind neutru. Acești mezoni au mase de repaus de valoarea

$$m^{\pi^\pm} = 273,123 m_e; \quad m^{\pi^0} = 264,11 m_e \quad (12.3.24)$$

și s-au dovedit a fi mezoni nucleari, întrucât ei interacționează puternic cu nucleonii.

Pe baza existenței mezoniilor $\pi^{\pm 0}$ a fost imaginat *mecanismul de schimb al forțelor nucleare*. El se realizează potrivit următoarelor scheme

$$\begin{aligned} {}^1_1p &\rightarrow {}^1_0n + {}^0_{+1}\pi; \quad {}^1_0n \rightarrow {}^1_1p + {}^0_{-1}\pi \\ {}^1_1p &\rightarrow {}^1_1p + {}^0_0\pi; \quad {}^1_0n \rightarrow {}^1_0n + {}^0_0\pi. \end{aligned} \quad (12.3.25)$$

Se observă că interacția dintre doi nucleoni constă, potrivit acestor scheme, dintr-un schimb reciproc de mezoni π , nucleonul putînd trece din starea lui de proton în starea de neutron și invers.

Desigur, caracterul de schimb al forțelor nucleare, exprimat prin schemele de tranziție (12.3.25), necesită o anumită explicație, întrucât pare cu totul surprinzătoare prima tranziție în care un proton cu $m_p = 1836,15 m_e$ poate să treacă într-un neutron cu masă de repaus mai

mare decât a protonului ($m_p = 1838,7 \cdot m_e$) și un mezon π^\pm cu $m_{\pi^\pm} = 273 m_e$. De altfel, se constată ușor că nici în celelalte tranziții, prezentate în (12.3.25), nu se conservă masa și deci nici energia. Pentru a preciza caracterul cu totul deosebit al acestor mecanisme de interacție care se realizează prin intermediul schimbului de particule cu masă proprie nenulă și care se produc cu *violarea legii de conservare a energiei*, li s-a dat denumirea de *processe virtuale*. Semnificația lor mai profundă a fost dezvăluită ulterior, de studiul particulelor elementare (§ 12.10). Trebuie reținut însă că deși nici în privința particulelor elementare nu dispunem de o teorie unitară și încheată, s-a constatat că în domeniul proceselor virtuale se pot obține informații și interpretări utile pe baza relațiilor de nedeterminare (8.3.18) și (8.3.19), respectiv pe baza relațiilor de corelație (8.7.8) și (8.7.9) ale lui Heisenberg. Aceste relații leagă durata Δt a unei stări cuantice de nedeterminarea ΔE a energiei respectivei stări, iar extinderea spațială Δx a unei stări de nedeterminarea Δp_x a impulsului microparticulei, prin relații de forma

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq h; \quad \Delta x \cdot \Delta p_x \geq h. \quad (12.3.26)$$

Într-o astfel de imagine, trecerea ${}^1_1p \rightarrow {}^1_0n + {}^0_{-1}\pi$ devine posibilă, așa cum se vede pe figura 12.3.2. Dacă se ia $\Delta E = m_\pi c^2$, atunci pentru Δt rezultă din prima relație (12.3.26) valoarea

$$\Delta t = \Delta t_n = 4,7 \cdot 10^{-24} \text{ s}. \quad (12.3.27)$$

Un interval de timp așa de scurt Δt_n , numit și *timp nuclear*, reprezintă limita inferioară a intervalelor de timp în care mai pot avea loc fenomene fizice decelabile cu mijloacele de detecție de care dispunem astăzi. Din acest motiv, de existența unor astfel de fenomene ne putem da seama numai pe căi indirecte, procesele care se desfășoară în intervale de timp de ordinul lui Δt_n primind atributul de *processe virtuale*.

Se poate spune, deci, că potrivit teoriei mezonice a forțelor nucleare interacția dintre nucleonii vecini din cadrul unui nucleu atomic se realizează printr-un schimb de mezoni π^\pm virtuali. Pe baza acestei concluzii au putut fi explicate unele dintre caracteristicile forțelor nucleare, și anume:

— Raza scurtă de acțiune R_0 este determinată de timpul de viață Δt_n extrem de scurt al mezoniilor π^\pm virtuali, timp în care dacă ei s-ar mișca chiar cu $v \lesssim c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$, tot n-ar putea străbate distanțe mai mari de $1,4 \div 1,5 \text{ fm}$, cât este de fapt raza de acțiune R_0 a forțelor nucleare.

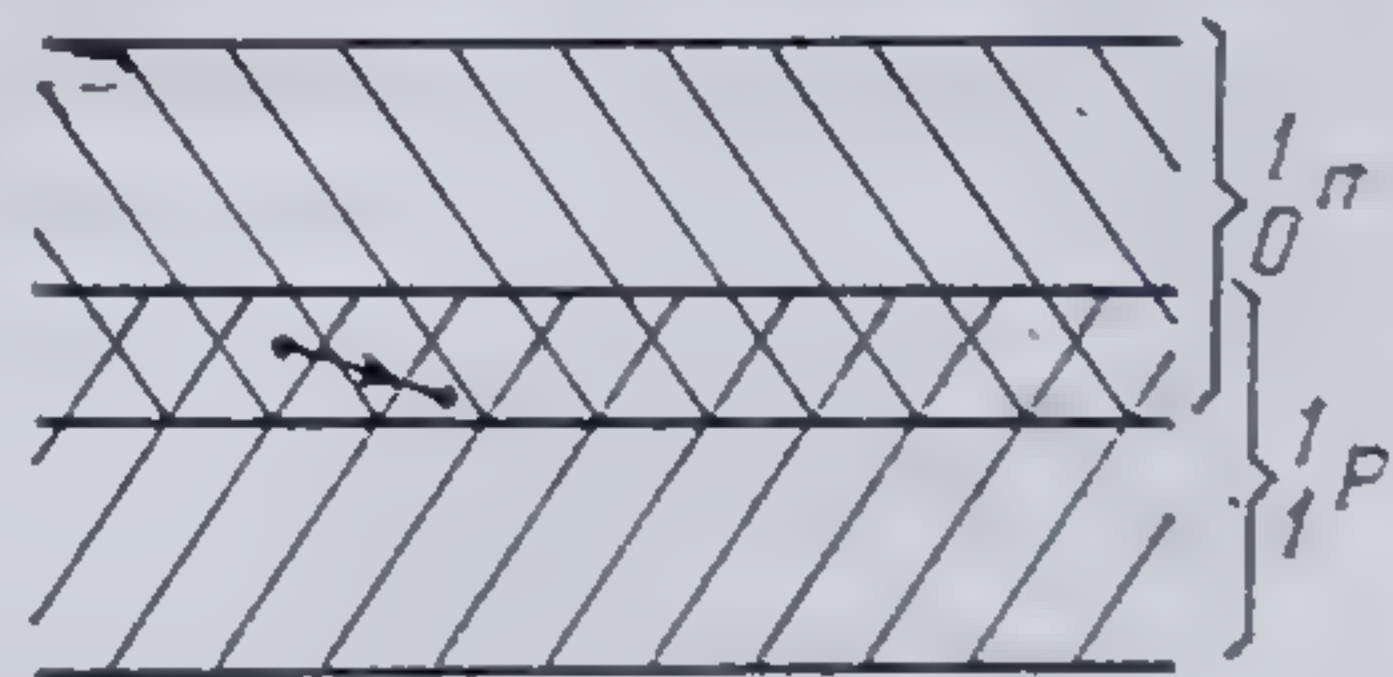


Fig. 12.3.2

— Caracterul de saturație al forțelor nucleare este determinat de faptul că dacă un mezon π virtual întâlnește în cale, pe distanța R_0 , alți nucleoni, atunci el va fi captat de aceștia și va realiza o legătură nucleară între ei. În caz contrar, mezonul π se descompune în alte particule (electroni e^- și pozitroni e^+ , mezoni μ^\pm , neutrini ${}^0_0\nu$ sau antineutrini ${}^0_0\bar{\nu}$), care sînt expulzate din nucleu. Prin urmare, un nucleon nu va putea interac-

ționa decât cu primii săi vecini, care se găsesc în sfera de atracție nucleară, de rază R_0 .

— Intensitatea mare a forțelor nucleare poate fi obținută dintr-o funcție de tip Yukawa (12.3.21), dacă pentru sarcina g (nefiind vorba de o sarcină electrică, ci de o sarcină „nucleonică”), se ia o valoare $g \simeq 5e$. Adesea, expresia (12.3.21) se scrie sub forma

$$V(r) = - V_0 \frac{e^{-\frac{r}{R_0}}}{r} \quad (12.3.28)$$

în care pentru deuteron trebuie să luăm $V_0 = 41,5 \text{ MeV}$, și $R_0 = 1,58 \text{ fm}$.

— Caracterul de schimb al forțelor nucleare este pus, în cadrul teoriei mezonice, pe seama existenței unui singur tip de particule nucleare, *nucleonul* — particulă cu spin $I = 1/2$, isospin $T = 1/2$, sarcină barionică $A = 1$, care se poate găsi în două stări cuantice: *starea de proton* cu $Z = 1$ și $T_3 = 1/2$ și *starea de neutron* cu $Z = 0$ și $T_3 = -1/2$. Treccerile între aceste două stări se realizează prin intermediul „cuantelor” câmpului nuclear, care sînt tocmai mezonii π .

Trebuie totuși să subliniem că teoria mezonică nu a reușit să explice alte proprietăți ale forțelor nucleare, cum este caracterul lor de forțe necentrale, iar „potrivirea” masei determinate a mezonilor cu cea rezultată din calcul este numai în limita a 10 %. Există și cîteva modele în care se încearcă să se elaboreze o nouă teorie a forțelor nucleare, care să țină seama și de orientarea reciprocă a spinilor nucleonici, dar rezultatele obținute sînt încă departe de a fi satisfăcătoare. Dealtfel, încă de la început s-a putut constata că teoria mezonică, bazată pe un potențial scalar de tip Yukawa și pe un mecanism de schimb unimezonic între doi nucleoni vecini, este prea simplă. Printre încercările de a dezvolta o teorie bazată pe un câmp mezonic scalar se remarcă și cele ale fizicianului român Alexandru Proca (1897 — 1955), care a obținut ecuațiile generale ale unui astfel de câmp mezonic scalar și soluțiile lor, extinzînd astfel domeniul de aplicabilitate al teoriei mezonice.

În figura 12.3.3 este redată o curbă de variație a energiei de interacție dintre doi nucleoni, obținută prin studii experimentale de difuzie a nucleonilor de energie $E \simeq 10 \div 20 \text{ MeV}$ pe nucleon. De notat că numai pe porțiunea AB din această curbă este aplicabilă teoria lui Yukawa. Porțiunea BC se încadrează aproximativ în modelul câmpului mezonic scalar, iar pentru porțiunea CD , în care intervin forțe de repulsie puternice, se încearcă modele bazate pe existența unui câmp mezonic vectorial, introdus în anul 1960 de către G. Brien. Potrivit acestui model, nucleonul ar trebui să prezinte o anumită structură internă, cu un miez „gol”, de rază $r_0 \simeq 0,2 \text{ fm}$, idee care, așa cum se va vedea în §12.10, se regăsește și în teoria particulelor elementare.

Cunoașterea funcției potențiale $V(r)$ ar permite, desigur, stabilirea expresiei dependenței de distanță a forțelor de interacție nucleară dintre

doi nucleoni. Dar experiențele arată că o curbă de forma (12.3.3) nu este valabilă pentru orice energie a nucleonilor. Forma ei se modifică sensibil atunci când energia acestor nucleoni crește de la ordinul sutelor de MeV, la cel al miilor de MeV. De aceea, este puțin probabil că se va putea construi o teorie completă a forțelor nucleare, mergînd numai pe calea pur fenomenologică (așa cum s-a obținut de exemplu teoria forțelor electromagnetice din cunoașterea legii lui Coulomb), ci va fi nevoie de principii și ipoteze cu totul noi. În teoria particulelor elementare, forțele nucleare au început să fie privite ca *derivate slabe ale interacțiilor directe dintre quarci*, care se realizează printr-un câmp gluonic vectorial (vezi §12.10).

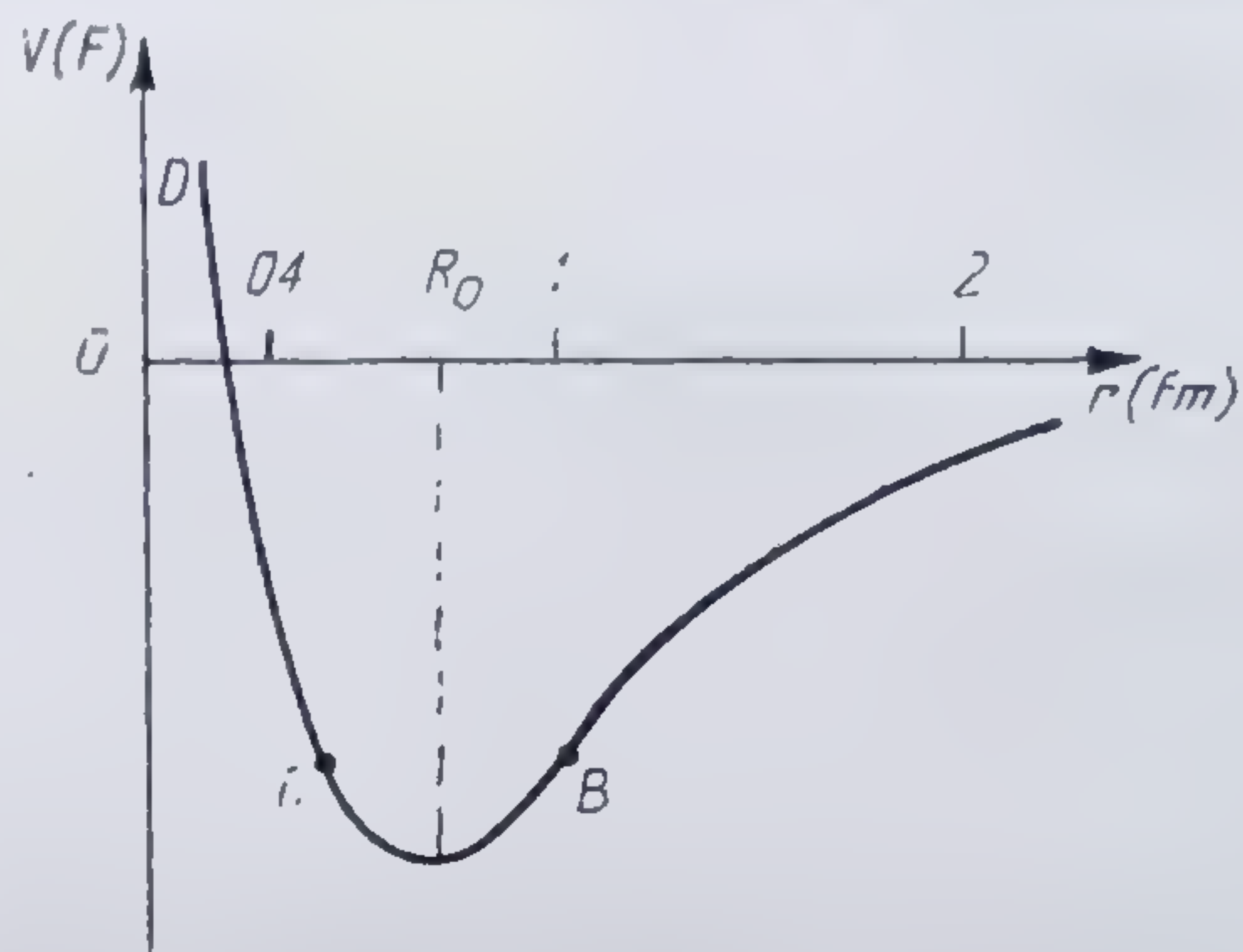


Fig. 12.3.3

§ 12.4. MODELE NUCLEARE

În paragrafele precedente au fost prezentate cîteva dintre proprietățile nucleelor atomice, determinate atît de structura lor protono-neutronică, cît și de natura și caracteristicile forțelor nucleare. Pe baza acestor elemente au fost elaborate, la diverse etape de dezvoltare a cunoștințelor noastre despre nucleu, *modele nucleare*, în care nucleul este privit ca un anumit tip de sistem de nucleoni aflați în interacțiune. Deoarece prin fiecare model nuclear s-a încercat să se explice un anumit grup de proprietăți sau de procese nucleare, s-a ajuns ca astăzi să existe mai multe astfel de modele nucleare, situație neîntîlnită la atom, unde, așa cum s-a văzut în § 10.1, modelele atomice s-au succedat unul după altul, prin eliminarea celui precedent de către cel ulterior, pînă s-a ajuns la teoria cuantică a atomului, capabilă să explice coerent și unitar totalitatea proprietăților și proceselor atomice.

O astfel de situație nu trebuie să ne surprindă, de vreme ce încă nu dispunem de o teorie desăvîrșită a forțelor nucleare. Din acest motiv, problema modelelor nucleare este și în prezent o problemă de mare actualitate în studiul nucleului, dovadă fiind faptul că două dintre aceste modele și anume cel al păturilor nucleare, creat în anul 1949 și cel generalizat, creat în anul 1953 au adus autorilor lor premiul Nobel, în anul 1963 și respectiv în 1977.

Modelele nucleare existente astăzi pot fi grupate în trei clase distincte și anume : 1) *modele colective*, bazate pe ideea existenței unei mișcări globale colectivizate a nucleonilor; 3) *modele uniparticulă* bazate pe ideea că mișcarea unui nucleon se face în câmpul selfconsistent al celorlalți nu-

cleoni din nucleu ; 3) *modelul generalizat*, care combină cele două puncte de vedere.

1. Din rîndul *modelelor nucleare colective* fac parte : *modelul în picătură sferică*, *modelul în picătură nesferică*, *modelul statistic* și *modelul optic*. Cel mai cunoscut dintre aceste modele este modelul în picătură sferică, elaborat în anul 1936 de Niels Bohr. În formularea acestui model s-a plecat de la ideia că datorită razei scurte de acțiune a forțelor nucleare și al caracterului de saturație al acestor forțe, fiecare nucleon va fi supus unor puternice forțe de interacție, dar numai din partea nucleonilor vecini, aflați în sfera de interacție nucleară, de rază R_0 ($R_0 = (1,2 \div 1,5)$ fm). Starea unui nucleon va fi, în acest caz, similară stării unei molecule dintr-un lichid și de aceea substanța nucleară va putea fi asemuită unui „lichid nucleonic”, de densitate constantă, în a cărei stabilitate rolul forțelor superficiale devine la fel de însemnat ca și în cazul picăturilor de lichid. Dacă se ține cont de faptul că aproximativ jumătate din nucleonii unui nucleu se găsesc la suprafața acestuia, avem imaginea directă a rolului forțelor de „tensiune superficială nucleară” în asigurarea stabilității nucleului, rol pe care Niels Bohr l-a evidențiat îndeosebi în legătură cu studiul proceselor de fisiune nucleară.

Modelul în picătură a oferit, apoi, posibilitatea stabilirii așa-numitei *formule semiempirice a lui Weizsäcker*, cu ajutorul căreia se calculează masa $m(Z, A)$ a nucleelor atomice (respectiv energia de legătură nucleară W_{leg}). În stabilirea acestei formule se pleacă de la relația

$$m(Z, A) = Zm_p + (A - Z)m_n - \frac{W_{leg}}{c^2} \quad (12.4.1)$$

în care energia de legătură este dată de o sumă de termeni, de forma

$$W_{leg} = W_0 + W_1 + W_2 + W_3 + \dots \quad (12.4.2)$$

fiecare dintre acești termeni exprimînd, fenomenologic, contribuția unor factori distincți și de intensități diferite (din ce în ce mai mici) la energia nucleului.

O contribuție majoră revine interacției nucleare dintre nucleoni, a căror energie W_0 este proporțională cu numărul de nucleoni A din nucleu

$$W_0 = a_v A. \quad (12.4.3)$$

De observat că termenul W_0 poate fi denumit „energie de volum” a nucleului, întrucît volumul nuclear crește direct proporțional cu A .

Urmează apoi termenul W_1 care ia în considerare diminuarea energiei de legătură a nucleului, datorită faptului că nucleonii de la suprafața sa au parteneri de interacție numai înspre interiorul nucleului, nu și spre afara lui. De aceea, W_1 va aduce o contribuție negativă în expresia (12.4.2), proporțională cu aria $S = 4\pi R^2 = 4\pi R_0^2 A^{2/3}$ a nucleului, adică

$$W_s = -a_s A^{2/3}. \quad (12.4.4)$$

Termenul W_1 este denumit adesea „energie superficială a nucleului”.

Următorul termen W_2 din expresia (12.4.2) exprimă fenomenologic contribuția forțelor de repulsie coulombiană dintre protonii nucleari, care pentru o distribuție omogenă a acestora, într-un nucleu sferic de rază R , este de forma $W_2 = \frac{3}{2} \cdot \frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$ și deci

$$W_2 = -a_c \frac{Z^2}{A^{1/3}}. \quad (12.4.5)$$

Termenul W_2 poate fi denumit „energie coulombiană a nucleului”.

C. F. Weizsäcker observă că dacă se iau în considerație numai acești trei termeni, atunci din (12.4.1) se obține expresia

$$m(Z, A) = Zm_p + (A - Z)m_n - a_v A + a_s A^{2/3} + a_c \frac{Z^2}{A^{1/3}}. \quad (12.4.6)$$

Această expresie prezintă o valoare minimă, în raport cu Z și A , pentru cazul cînd: $\left(\frac{\partial m}{\partial Z}\right)_{Z=Z_0}$; $\left(\frac{\partial m}{\partial A}\right)_{A=A_0} = 0$. Dar se constată ușor că aceste valori corespund unui nucleu cu $A_0 = 132$ și $Z_0 = 3$, inexistent în natură și de aceea Weizsäcker admite ca necesară luarea în considerație și a contribuției următorilor doi termeni: W_3 — care reprezintă așa numita „energie de asimetrie” și $\delta(Z, A)$ — care reprezintă „energie de paritate”, despre care s-a vorbit în §12.2.

Energia de asimetrie este pusă pe seama faptului că nucleonii aparțin, așa cum s-a arătat în §12.2, clasei fermionilor. Din această cauză, în cadrul unui nucleu în picătură sferică, chiar și în prezența interacțiilor nucleare extrem de puternice, fiecare nucleon își va păstra o existență „individualizată”, în sensul că fiecare va ocupa singur o anumită stare cuantică nucleară, în conformitate cu principiul de excluziune a lui Pauli. De aceea, primele Z stări nucleare vor fi populate cu Z protoni și Z neutroni, iar restul de $A - 2Z$ stări vor fi populate numai cu neutroni care se vor găsi pe stările nucleare de la periferia nucleului și cărora le corespund nivele superioare de energie. Din acest motiv, energia de legătură se micșorează cu

$$W_3 = -a_a \frac{(A - 2Z)^2}{A}. \quad (12.4.7)$$

Prin folosirea unor valori determinate din experiență pentru coeficienții a_v , a_s , a_c și a_a , s-a găsit următoarea expresie pentru $m(A, Z)$

$$m(A, Z) = 0,99391 \cdot A - 0,00085Z + 0,014A^{2/3} + \\ + 0,0207 \frac{(A - 2Z)^2}{A} + 0,000627 \frac{Z^2}{A^{1/3}} + \delta(Z, A) \quad (12.4.8)$$

expresie cunoscută sub denumirea de formulă a lui Weizsäcker. Această formulă va fi folosită în paragrafele următoare, în explicarea unor procese nucleare și îndeosebi a fisiunii nucleare (§ 12.9).

Modelul în picătură nesferică reprezintă o generalizare a modelului picăturii creat de Bohr, cu scopul de a se explica existența nivelelor nucleare de rotație, evidențiate de structura de rotație a spectrelor radiațiilor nucleare. Este vorba de o generalizare „clasică”, în care se admite că la un anumit grad de excitare a unui nucleu sferic pot să intervină mișcări de oscilație ale nucleonilor (de exemplu ale protonilor față de neutroni), care să conducă la o deformare a nucleului (fig. 12.4.1). Din această cauză

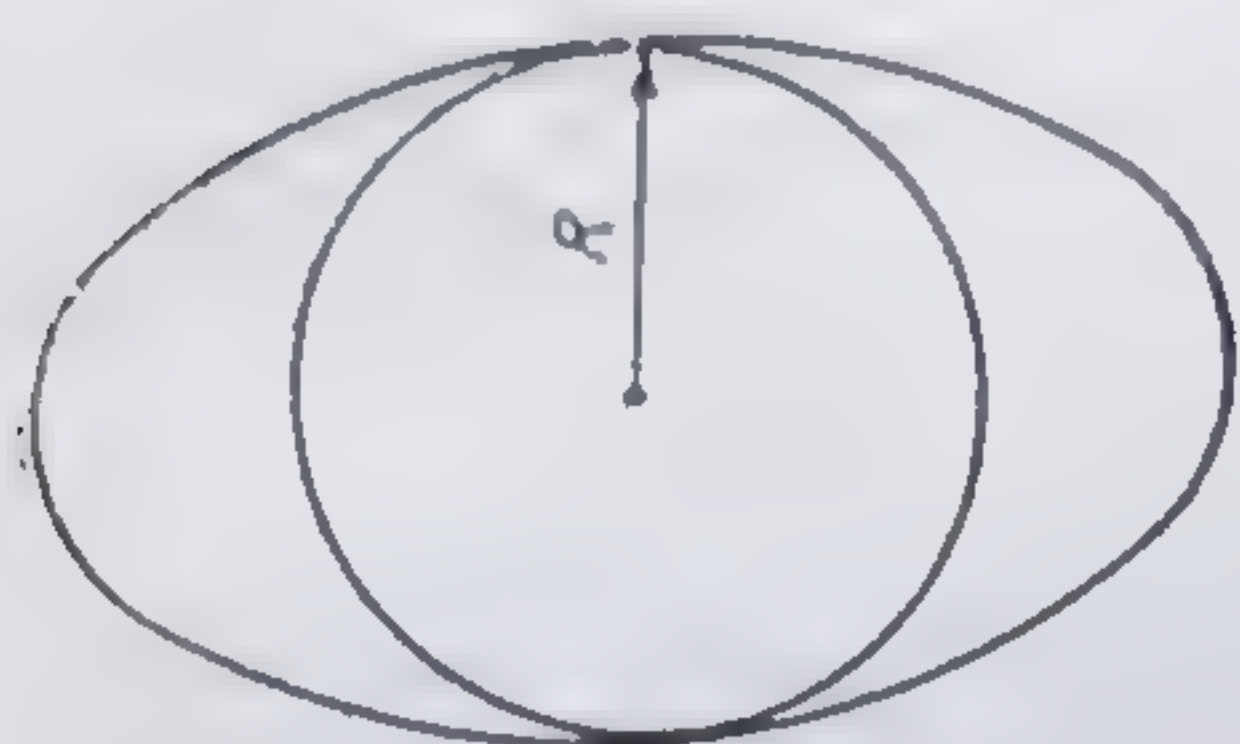


Fig. 12.4.1

vor apărea momente nucleare de cvadrupol $Q \neq 0$, respectiv momente cinetice orbitale diferite de zero (care pot determina o structură de rotație nivelelor nucleare, așa cum s-a arătat în § 12.2).

Modelul statistic a fost elaborat de către I. Frenkel în anul 1936, prin introducerea noțiunii de temperatură nucleară T_N și a unei tratări statistice a „fluidului nuclear”. La o energie pe nucleon de 8 MeV va corespunde, de exemplu, o temperatură nucleară $T_N = 9,6 \cdot 10^{10}$ K. Dar acest model prezintă o mai mică importanță, fiind utilizat doar în descrierea calitativă a unor mecanisme de reacție nucleară, care sînt privite ca procese de evaporare a nucleonilor superficiali dintr-un nucleu „încălzit” prin intermediul energiei primită de la particula cu care a fost bombardat.

Modelul optic este folosit de asemenea în studiul reacțiilor nucleare ce se desfășoară la energii nu prea înalte (sub 20 MeV), fiind construit pe ipoteza că nucleul constituie, pentru particula cu care interacționează, un mediu pe care undele asociate ale acesteia suferă atît reflexii, cît și refracții și absorbții. De aceea, la fel cum pentru neutronii rapizi, o rețea cristalină trebuie privită ca un mediu cu indice de refracție complex, $n = n_1 + in_2$, și interacția nucleului atomic cu neutronii rapizi trimiși asupra lui va fi descriptibilă printr-o funcție potențială reală $V_1(r)$ și una imaginară $V_2(r)$, în așa fel încît procesul de interacție va putea fi exprimat de un hamiltonian de forma

$$H = V_1(r) + iV_2(r). \quad (12.4.9)$$

Procesele de împrăștiere elastică ale nucleonilor pe nucleu vor fi atunci descrise de termenul $V_1(r)$, iar cele de împrăștiere neelastică, de $V_2(r)$. Prin alegerea unor expresii adecvate pentru aceste funcții potențiale s-au putut calcula secțiunile eficace diferențiale și integrale ale unor astfel de procese de împrăștiere nucleară.

2. Din rîndul *modelelor uniparticulă* fac parte *modelul în pături nucleare*, creat de M. Goeppert-Mayer și J. Jensen și *modelul cuantic simplificat*, tratat pe baza unor gropi de potențial de forme simple, așa cum s-a văzut în cazul deuterionului.

Principalul suport al modelului în pături îl constituie existența *nucleelor magice*, adică a nucleelor pentru care, dacă numărul de protoni sau de neutroni este egal cu unul dintre următoarele *numere magice* 2, 8, 20, 28, 50, 82 și 126 (28 și 126 fiind pentru neutroni), atunci energia lor de

legătură este sensibil mai mare decât a nucleelor imediat vecine acestora. În figura 12.4.2 este redată situația ${}^4_2\text{He}$, dar cazuri similare se întâlnesc și la ${}^{16}_8\text{O}$, ${}^{40}_{20}\text{Ca}$, ${}^{48}_{20}\text{Ca}$, ${}^{208}_{82}\text{Pb}$.

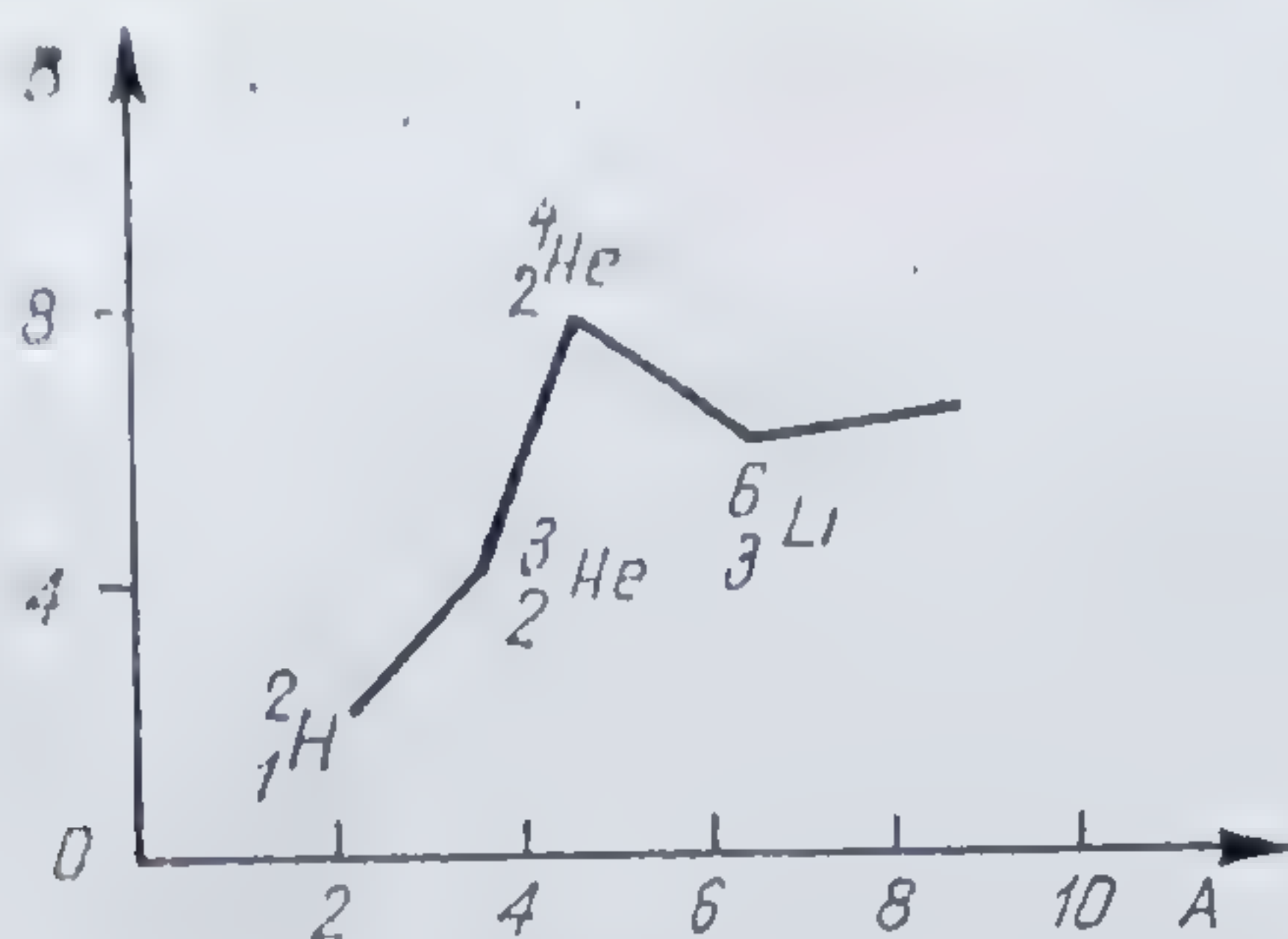


Fig. 12.4.2

De remarcă că nucleele de ${}^4_2\text{He}$, ${}^{16}_8\text{O}$, ${}^{40}_{20}\text{Ca}$ și ${}^{208}_{82}\text{Pb}$ sunt nuclee „dublu magice”, în sensul că pentru ele atât numărul protonilor cât și cel al neutronilor sunt numere magice. De asemenea, cu toate că și nucleul de ${}^{132}_{50}\text{Sn}$ este un nucleu dublu magic, comportamentul lui se aseamănă mai mult cu cel al nucleelor obișnuite decât cu al celor magice.

Modelul în pături a fost creat plecându-se de la ideea existenței unor mișcări individuale (descrie de funcții de undă de tip uniparticulă) ale nucleonilor într-un *cîmp nuclear selfconsistent*. Noțiunea de cîmp selfconsistent a fost introdusă și la atom și moleculă (vezi § 10.7); în cazul de față ea exprimă situația în care fiecare nucleon se găsește sub acțiunea mediată a cîmpului generat de ceilalți nucleoni din nucleu. Dar dacă la atom sau moleculă s-a putut admite generarea cîmpului selfconsistent de forțe cu caracter central, o astfel de ipoteză nu mai rămîne valabilă și în cazul nuclear; de aceea, sîntem nevoiți să descriem acest cîmp printr-o funcție potențială $V(r)$, construită ad-hoc, pe baza unor considerente inspirate de informații experimentale. Fără a expune calculele pe care le implică un astfel de model, vom menționa totuși că acest procedeu ne conduce la punerea în evidență a nivelelor nucleonice cuantificate, nivele care se grupează, ca și cele atomice, fiecare grup conținînd nivelele care sînt cel mai apropiate energetic între ele și care formează o *pătură nucleară*.

Desigur, poziția pe scara energetică a fiecărui nivel nuclear este dată de numărul cuantic principal, de cel orbital l și respectiv de cel intern j (fig. 12.4.3). Această dependență se datorește unui cuplaj de tip spin-orbită ($j = l + I$). Avînd în vedere faptul că fiecare nivel este degenerat, vor interveni *multiplicități spectrale*, ca și în cazul atomic, care vor preciza numărul de stări nucleonice distincte ce aparțin unui anumit nivel nuclear. Notarea acestor stări se face în mod similar cu notarea stărilor atomice. De exemplu, starea notată prin $2^2p_{3/2}$ înseamnă starea cu $n = 2$, $l = 1$ și $j = 3/2$. Multiplicitatea fiind dată de m_j , care are $2j + 1$ valori,

adesea termenul „2” din partea stângă de sus a simbolului stării se omite. De asemenea, întrucît la nucleu, regula ca l să fie mai mic cu o unitate decît n își pierde valabilitatea, vor exista și stări de formă $1p$, $1d$, $1f$ ș.a.m.d.

În ceea ce privește diferențele ce apar între numărul de nucleoni care populează complet o pătură nucleară și numărul de electroni care

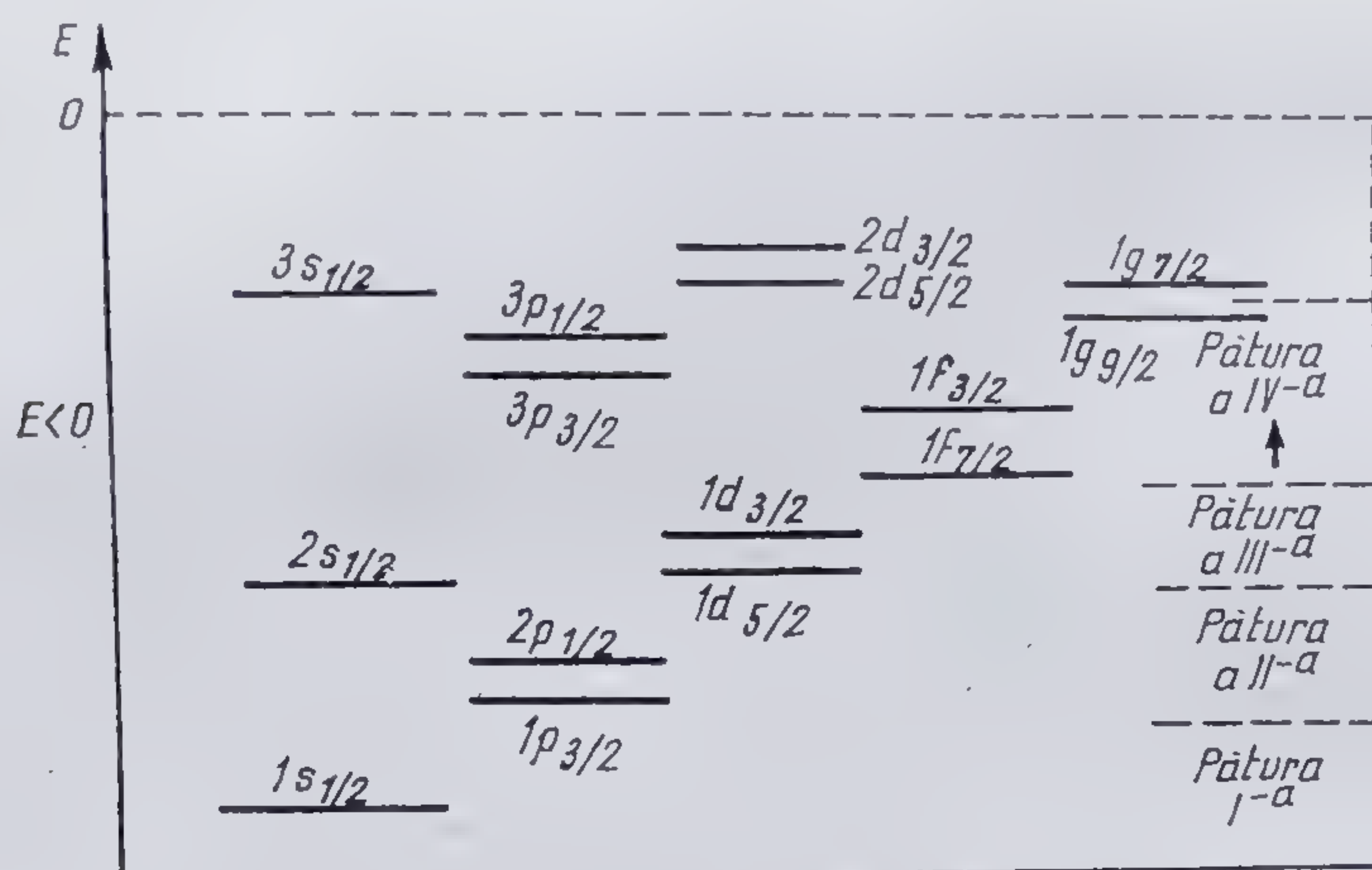


Fig. 12.4.3

populează complet o pătură atomică (primele sînt egale cu numerele magice 2, 8, 20, 50, 82, 126, iar ultimele cu : 2, 10, 18, 36, 54, 86, ... și corespund elementelor nobile ${}^2\text{He}$, ${}^{10}\text{Ne}$, ${}^{18}\text{Ar}$, ${}^{36}\text{Kr}$, ${}^{54}\text{Xe}$ și ${}^{86}\text{Rn}$), acestea sînt semnificative, începînd chiar cu a doua pătură nucleară. Aceste diferențe se pun pe seama interacției spin-orbită care, în cazul nuclear fiind mult mai puternică, determină o separare mult mai drastică decît la atom a nivelelor energetice. Din această pricină, la nucleu vor interveni suprapuneri ale unor nivele energetice începînd cu nivelul $2s_{1/2}$, care se situează deasupra nivelului $1d$, în așa fel încît gruparea în pături nucleare a nivelelor cu energie apropiată se va face după alte reguli decît cele practicabile la atom, menționate în §10.3.

Astfel, pătura nucleară $1s_{1/2}$ este compusă, de fapt, din două nivele diferite, unul corespunzător protonului, iar celălalt neutronului și, prin urmare, ea va putea fi populată de maximum 4 nucleoni — doi protoni și doi neutroni — situație întâlnită la primul nucleu dublu magic de He (atît Z cît și $A - Z$ sînt numere magice). În schimb, următoarea pătură nucleară va cuprinde patru stări $1p_{3/2}$ și cele două stări $1p_{1/2}$ (vezi fig. 12.4.3), pe care se vor putea găsi 6 protoni, respectiv 6 neutroni, care împreună cu precedentii 4 nucleoni de pe $1s_{1/2}$ formează a doua pătură nucleară, cu 8 protoni și 8 neutroni, situație întâlnită la cel de al doilea nucleu dublu magic, care este nucleul de ${}^{16}\text{O}$.

A treia pătură nucleară cuprinde nivelele $2s_{1/2}$; $1d_{5/2}$ (cu multiplicitatea 6) și $1d_{3/2}$ (cu multiplicitatea 4), ultimele două nivele situîndu-se ușor

deasupra lui $2s_{1/2}$. De aceea, pe această pătură vor exista 12 stări nucleare, care împreună cu precedentele 8 (ale primei și celei de a doua pături) vor forma 20 stări nucleare distincte, ce pot fi populate cu 20 protoni, respectiv cu 20 neutroni, situație întâlnită la următorul nucleu dublu magic $^{40}_{20}\text{Ca}$.

Pătura a 4-a cuprinde stările $1f_{7/2}$, $1f_{5/2}$, $2p_{3/2}$, $2p_{1/2}$ și $1g_{9/2}$, deci în total 30 stări nucleare, cu mențiunea că starea $1f_{7/2}$ se află destul de jos, sub celelalte 4 stări (fig. 12.4.3) și formează singură o *subpătură neutronică*, care corespunde nucleului magic $^{48}_{20}\text{Ca}$ (cu $N = A - Z = 28$). Prin urmare, pătura a 4-a cuprinde 30 stări distincte, care împreună cu precedentele 20 (ale primelor trei pături) formează 50 de stări nucleare distincte, populate cu tot atâția protoni, situație întâlnită la nucleul de $^{132}_{50}\text{Sn}$. De remarcat însă că acest nucleu conține un număr de neutroni sensibil mai mare decât 50, ceea ce înseamnă că 32 dintre neutronii săi vor popula incomplet cea de a 5-a pătură nucleară. Această pătură conține stările $1g_{7/2}$, $2d_{5/2}$, $2d_{3/2}$, $3s_{1/2}$, și $1h_{11/2}$, în care încap un total de 82 de stări nucleonice (împreună cu cele precedente) care vor fi complet populate în cazul nucleului de $^{208}_{82}\text{Pb}$. Din această cauză, stabilitatea nucleului de $^{132}_{50}\text{Sn}$ nu este mult diferită de a celor nemagice.

De remarcat, de asemenea, că și nucleul de $^{208}_{82}\text{Pb}$ este un nucleu dublu magic întrucât surplusul de 126 neutroni populează complet cea de a 6-a pătură nucleară, care este formată din stările $1h_{9/2}$, $2f_{7/2}$, $2f_{5/2}$, $3p_{3/2}$, $3p_{1/2}$ și $1i_{13/2}$. Este iarăși interesant de observat că următoarea pătură nucleară complet populată ar corespunde unui nucleu cu $Z = 114$ și $A = 289$, dar un astfel de nucleu încă nu a fost pus în evidență (ultimul nucleu descoperit are $Z = 107$ și timpul de viață $\tau = 2 \cdot 10^{-3}$ s, el neavînd încă un nume).

Trebuie notat că modelul nuclear în pături reușește să explice suficient de bine atât paritatea cât și spinul nucleelor atomice. Concluzia la care acest model conduce constă în aceea că pentru pături nucleare complet populate paritatea este (+1), iar spinul nuclear $I = 0$ (ca și în cazul atomic). De menționat că în cadrul acestui model s-a reușit să se interpreteze pînă și valorile numerice ale momentelor nucleare, valori care pot fi determinate cu mare precizie din măsurători de RMN. Dar pentru aceasta s-a admis că momentele nucleare sînt momente interne, compuse din cuplajul momentelor orbitale și ale celor de spin nuclear ($\langle \mu_j \rangle = \langle \mu_l \rangle + \langle \mu_s \rangle$). În §12.2 s-a văzut că pentru a obține astfel de corespondențe Schmidt a admis că cuplarea spin-orbită intervine și la nivelul nucleonilor.

Modelul în pături nucleare n-a fost însă în stare să explice apariția momentelor nucleare de cvadrupol decât la nucleele magice (cînd $Q = 0$). Așa cum s-a văzut mai sus, această caracteristică nucleară este însă satisfăcător descriptibilă în cadrul modelelor nucleare de tip picătură. Pe baza unei astfel de constatări au fost elaborate, începînd cu anul 1953, *modele nucleare generalizate*, în care sînt cuprinse atât aspecte de la modelele colective de tip picătură, cât și de la modelele uniparticulă, de tipul celui în pături nucleare.

3. *Modelele nucleare generalizate* Aceste modele sînt construite pe baza ipotezei că există un centru nuclear în picătură în care comporta-

mentul nucleonilor este cel descris de modelul nuclear în picătură și câțiva nucleoni periferiei cu comportament descris de modelul nuclear în pături.

Primul model de acest fel a fost creat de către Age Bohr, B. R. Mottelson și Rainwater. Ei au presupus că între partea centrală „în picătură” a nucleului și partea sa periferică „în pături” intervin interacții slabe, în așa fel încât acestea pot fi tratate ca perturbații într-o teorie a perturbațiilor. În acest scop se utilizează un hamiltonian de forma

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{picătură}} + \hat{H}_{\text{pături}} + \hat{H}_{\text{int}} \quad (12.4.10)$$

în care termenul \hat{H}_{int} joacă rol de perturbație. În aceste condiții pot lua naștere oscilații în partea centrală a nucleului, care vor determina atât apariția momentelor de cvadrupol, cât și o serie de modificări în privința păturilor nucleare ale nucleonilor periferiei. Așa, de exemplu, se constată că odată cu creșterea gradului de excitare a părții centrale a nucleului se micșorează tot mai mult distanța dintre păturile nucleare, ajungându-se la o contopire a lor într-un singur nivel, pentru nucleele puternic excitate.

Trebuie menționat că, ulterior, modelul nuclear generalizat cu interacție slabă a fost dezvoltat de către S. G. Nilson [30] în ipoteza existenței unor interacțiuni puternice între cele două tipuri de nucleoni și anume între cei total colectivizați din centrul sferic sau nesferic în picătură (care poate executa oscilații) și cei parțial colectivizați, care se găsesc pe păturile nucleonice exterioare ale nucleului. Pe baza unui hamiltonian de forma

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{pături}} + \hat{H}_{\text{picătură}} + \frac{1}{2} M \omega^2 r^2 + C \mathbf{I} \cdot \mathbf{I} + D \mathbf{I}^2 \quad (12.4.11)$$

s-au putut explica satisfăcător atât paritatea, momentele de spin, cele magnetice, momentele de cvadrupol Q , cât și gruparea spectrelor de rotație în benzi corespunzătoare diverselor stări de rotație. Dar nici modelele nucleare generalizate n-au reușit să ofere imagini unitare și complete asupra nucleului, aceasta pe de o parte datorită faptului că încă nu dispunem de o teorie unitară și completă asupra forțelor nucleare, iar pe de altă parte, pentru că „substanța nucleară” este compusă din nucleoni cu comportament net diferit atât de cel al fluidelor Fermi, cât și de cel al stărilor solide.

Este necesar să menționăm totuși că meritul deosebit al modelelor nucleare s-a relevat prin aceea că pe baza lor s-au putut descrie stările fundamentale și excitate ale nucleelelor, precum și tranzițiile ce pot interveni între aceste stări. Desigur, prin stare fundamentală se va înțelege starea în care nucleonii din nucleu posedă energia cea mai scăzută, stările slab excitate corespunzând unor salturi ale acestor nucleoni pe nivele cuantificate din cadrul păturilor superioare ale nucleului. La excitații mai mari, s-a văzut că structura în pături suferă transformări serioase, putându-se ajunge, în cazul excitațiilor foarte puternice, la contopirea acestor pături într-o singură stare energetică descrisă de modelul în picătură al nucleului.

În descrierea stărilor fundamentale și excitate ale nucleelelor intervin elemente comune cu cele întâlnite în cazul atomului sau în cel al moleculei, cum este, de exemplu, existența cuplajului spin-orbită care, pentru nuclee nu prea grele, poate fi presupus a fi de tip Russel-Saunders (vezi § 10.3).

Dar stabilirea stării unui nucleu este în general o problemă mult mai complexă decât cea din cazul atomului, deoarece aici intervin atât nuclee stabile cât și nuclee nestabile care se pot transforma spontan în nuclee stabile prin *procese de transmutație radioactivă*. Există, apoi, stări nucleare excitate metastabile, de viață lungă, care determină izomeria nucleară. După I. V. Kurecatov, existența acestor stări izomere este o dovadă a existenței regulilor de selecție în tranzițiile nucleare. Și în această privință există analogii cu cazul atomic, în sensul că aceste reguli sunt determinate de cerința ca variația numerelor cuantice orbitale să se facă cu o unitate sau de legea de conservare a parității. De exemplu, tranzițiile spre starea fundamentală de tip „zero-zero”, cu emisia unui singur foton ${}^0\gamma$, vor fi *tranziții interzise*, deoarece trebuie ca $\Delta l = \pm 1$.

De o deosebită importanță teoretică și practică sunt tranzițiile nucleare în care se modifică tipul și numărul nucleonilor dintr-un nucleu, care conduc la *transmutații nucleare*. Transmutațiile nucleare pot fi *spontane* sau *provocate* (forțate prin intermediul bombardării nucleelor cu particule). Primele sunt cunoscute sub denumirea de *transmutații radioactive*, iar celelalte, ca *reacții nucleare*, ambele fiind surse de radiații nucleare, de energie nucleară, așa cum vom vedea în paragrafele ce urmează.

§ 12.5. RADIOACTIVITATEA

Fenomenul denumit radioactivitate, a fost descoperit în anul 1896 de către H. Becquerel, care a constatat că un cristal de uraniu emite radiații cu mare putere de penetrație, capabile să impresioneze emulsia fotografică. Ulterior, prin cercetări laborioase, întreprinse în Franța de către Marie și Pierre Curie și în Anglia de către Rutherford, au fost puse în evidență o serie de elemente care posedă această proprietate, denumite *radioactive*. S-a stabilit totodată că fenomenul de radioactivitate constă dintr-o transmutație a nucleelor atomice, transmutație însoțită de emisia unor radiații nucleare, care pot fi de tip α (formate din nuclee de heliu), β (formate din electroni) sau γ (formate din cuante de radiații electromagnetice cu $\lambda < 0,01$ Å). Astăzi se știe că din cele aproximativ 330 de specii atomice prezente în natură, numai 25 manifestă proprietăți radioactive; ele au primit denumirea de *izotopi radioactivi naturali*. În anul 1934, Irène și Frédéric Joliot-Curie reușesc să obțină *izotopi radioactivi artificiali*, prin bombardarea izotopilor stabili cu anumite particule (vezi § 12.6). Spre deosebire de izotopii radioactivi naturali, cei artificiali emit și radiație β^+ (formată din pozitroni).

Atât radioactivitatea naturală cât și cea artificială sunt în general procese exoenergetice [106]. Ele se desfășoară în conformitate cu anumite legi „de deplasare”, respectiv „de dezintegrare”. Primele se referă la conservarea numerelor de sarcină Z și a numerelor de masă A în procesele de transmutație radioactivă și se exprimă sub forma

$${}_Z^AX \rightarrow {}_{Z-2}^{A-4}Y + {}_2^4\alpha, \quad {}_Z^AX \rightarrow {}_{Z\mp 1}^AY + {}_{\pm 1}^0\beta, \quad {}_Z^AX^* \rightarrow {}_Z^AX + {}^0\gamma. \quad (12.5.1)$$

De remarcă că întrucît numărul de masă A variază cu 4 unități în cadrul dezintegrărilor de tip α ale nucleelor radioactive naturale, după cîteva astfel de procese se va ajunge la un nucleu în care excesul de neutroni este mult mai mare decît cel care ar corespunde stabilității respectivului nucleu față de dezintegrarea β^- (vezi § 12.2). De aceea, între procesele de dezintegrare α sînt intercalate procese de dezintegrare β^- în care Z crește cu o unitate. Se generează astfel suite de nuclee α - sau β^- -active, care se încheie cu cîte un izotop stabil și care au primit numele de *familii radioactive*. Există numai patru familii radioactive, întrucît nucleele „cap de familie” sînt întotdeauna α -active și deci pentru ele A poate avea numai următoarele patru valori $A = 4n, 4n + 1, 4n + 2$ și $4n + 3$ (n fiind un număr întreg, vezi tabelul de mai jos).

Nr. crt.	Denumirea familiei	Numărul A al capului de familie	Numărul de membri ai familiei	Izotopul stabil care încheie familia
1	Familia toriului ${}^{232}_{90}\text{Th}$	$4n = 232$	12	${}^{208}_{82}\text{Pb}$
2	Familia neptuniului ${}^{237}_{93}\text{Np}$	$4n + 1 = 237$	14	${}^{209}_{83}\text{Bi}$
3	Familia uraniului ${}^{238}_{92}\text{U}$	$4n + 2 = 238$	16	${}^{206}_{82}\text{Pb}$
4	Familia actiniului ${}^{235}_{92}\text{U}$	$4n + 3 = 235$	15	${}^{207}_{82}\text{Pb}$

Legile de dezintegrare reflectă caracterul spontan al dezintegrărilor radioactive și sînt, deci, legi de natură statistică. Ele au fost puse în evidență mai întîi pe cale experimentală. Încă în anul 1908, Rutherford constată, prin măsurători spectroscopice, că intervine o scădere în timp de formă exponențială a cantității de radon gazos (${}^{222}_{86}\text{Rn}$), închis într-un tub de descărcare electrică. Radonul este un gaz radioactiv inert și se formează prin dezintegrarea α a nucleelor de radium



În schimb, dacă se înregistrează variația în timp a cantității de radon din tubul închis în prezența clorurii de radium (RaCl_2) care l-a generat, atunci se obține la început o creștere bruscă a cantității de radon, urmat apoi de o stabilizare a acestei cantități la o valoare riguros constantă în timp, dependentă de cantitatea de clorură de radium existentă în tub. Toate aceste rezultate experimentale au putut fi explicate pe baza teoriei statistice a dezintegrărilor radioactive.

În elaborarea acestor teorii se admite că fiecare nuclid radioactiv este caracterizat printr-o *constantă radioactivă* λ , care exprimă probabilitatea de dezintegrare a unui nucleu din specia respectivă în timp de o

secundă. Atunci, într-un interval de timp dt , dintr-un număr N de nuclee radioactive de același tip se vor dezintegra un număr

$$-dN = \lambda N dt \quad (12.5.3)$$

semnul ($-$) marcînd faptul că este vorba de o scădere în timp a numărului de nuclee rămase nedezintegrate. Prin separarea variabilelor în (12.5.3) și integrare rezultă:

$$N = N_0 e^{-\lambda t} \quad (12.5.4)$$

relație care exprimă legea *dezintegrării radioactive* pentru cazul cînd nucleul rezultat din prima transmutație radioactivă este stabil.

De notat că în legea (12.5.4), N reprezintă numărul de nuclee rămase nedezintegrate la momentul t , iar N_0 numărul de nuclee existente la momentul inițial $t = 0$. Constanta radioactivă λ din această lege nu se determină direct, ci prin intermediul unei alte mărimi $T_{1/2}$, denumită *timp de înjumătățire*. Timpul de înjumătățire este egal cu intervalul de timp după care jumătate din numărul inițial de nuclee s-a dezintegrat. Se vede, din condiția $N_0/2 = N_0 e^{-\lambda T_{1/2}}$, că rezultă

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} = \frac{0,693}{\lambda}. \quad (12.5.4)$$

Domeniul de variație a timpului de înjumătățire $T_{1/2}$ este extrem de vast, începînd cu $T_{1/2} = 10^{-6}$ s la $^{215}_{86}\text{Rn}$ și mergînd pînă la $T_{1/2} = 1,4 \cdot 10^{17}$ ani la $^{209}_{82}\text{Pb}$. Dar pentru caracterizarea stabilității nucleelor radioactive față de dezintegrare se folosește adesea noțiunea de *durată medie de viață* τ (sau simplu, *viața medie*), definită prin expresia

$$\tau = \frac{1}{N_0} \int_0^\infty t(-dN) = \frac{1}{\lambda} \simeq 1,44 T_{1/2}. \quad (12.5.5)$$

Un nuclid este considerat stabil dacă $\tau \geq 10^9$ ani, cît este vîrsta probabilă a Terrei.

În caracterizarea surselor radioactive se mai folosesc timpii „de nouă zecimi” $T_{9/10}$ și „de o zecime”, $T_{1/10}$, definiți prin intervalele de timp în care 9/10, respectiv 1/10 din numărul de nuclee existente inițial în proba radioactivă se dezintegrează. Se poate arăta ușor că $T_{9/10} = 3,322 T_{1/2}$ și $T_{1/10} = 0,152 T_{1/2}$. Mărimea $T_{9/10}$ permite aprecierea intervalelor de timp, după care un preparat radioactiv devine practic inofensiv, iar mărimea $T_{1/10}$ precizează intervalul de timp în care activitatea respectivului preparat rămîne parctic constantă.

Prin *activitate radioactivă* Λ se înțelege numărul de dezintegrări produse în unitatea de timp, deci

$$\Lambda = \lambda N. \quad (12.5.6)$$

Înlocuind aici expresia (12.5.4), rezultă că și activitatea Λ variază exponențial cu timpul, conform relației

$$\Lambda = \Lambda_0 e^{-\lambda t}. \quad (12.5.7)$$

În SI, unitatea de măsură a activității radioactive Λ este becquerelul ($1\text{Bq} = 1 \text{ dez/s}$), dar în practică se folosește de obicei curiul ($1\text{Ci} = 3,7 \cdot 10^{10} \frac{\text{dez}}{\text{s}}$) și rutherfordul ($1\text{Rd} = 10^6\text{Bq}$).

Să vedem, în continuare, care sînt legile de dezintegrare într-o familie radioactivă. În acest scop, vom analiza mai întîi cazul simplu în care $A \xrightarrow{\lambda_A} B \xrightarrow{\lambda_B} C$, nucleul C fiind un nucleu stabil. Avînd în vedere că variația în timp a numărului nucleelor de tip B este dată de diferența numărului de nuclee de tip A și de tip B ce se dezintegrează în timp de o secundă, vom putea scrie

$$\frac{dN_B}{dt} = \lambda_A N_A - \lambda_B N_B \quad (12.5.8)$$

din care, cu $N_A(t) = N_A(0) \exp[-\lambda_A t]$, rezultă ecuația

$$\frac{dN_B}{dt} + \lambda_B N_B = \lambda_A N_A(0) e^{-\lambda_A t}. \quad (12.5.9)$$

Vom căuta, pentru această ecuație, o soluție de forma

$$N_B(t) = N_A(0) [C_1 e^{-\lambda_A t} + C_2 e^{-\lambda_B t}] \quad (12.5.10)$$

care, cu condiția inițială $N_B(0) = 0$ și cu condiția de a verifica ecuația (12.5.8), se reduce la forma :

$$N_B(t) = N_A(0) \frac{\lambda_A}{\lambda_B - \lambda_A} [e^{-\lambda_B t} - e^{-\lambda_A t}]. \quad (12.5.11)$$

Această expresie admite un maxim pentru

$$t_{max} = \frac{1}{\lambda_B - \lambda_A} \ln \frac{\lambda_B}{\lambda_A} \quad (12.5.12)$$

interval de timp după care, desigur, numărul de nuclee de tip B devine maxim.

Funcție de valorile relative ale celor două constante de dezintegrare radioactivă λ_A și λ_B pot interveni următoarele cazuri particulare [107]:

a) $\lambda_A > \lambda_B$, astfel încât $e^{-\lambda_B t} \gg e^{-\lambda_A t}$. În aceste condiții expresia (12.5.11) se reduce la forma

$$N_B(t) = N_A(0) \frac{\lambda_A}{\lambda_A - \lambda_B} e^{-\lambda_B t} \quad (12.5.13)$$

și exprimă faptul că după un anumit interval de timp variația numărului de nuclee de tip B nu mai depinde de prezența nucleelor de tip A (fig. 12.5.1, a).

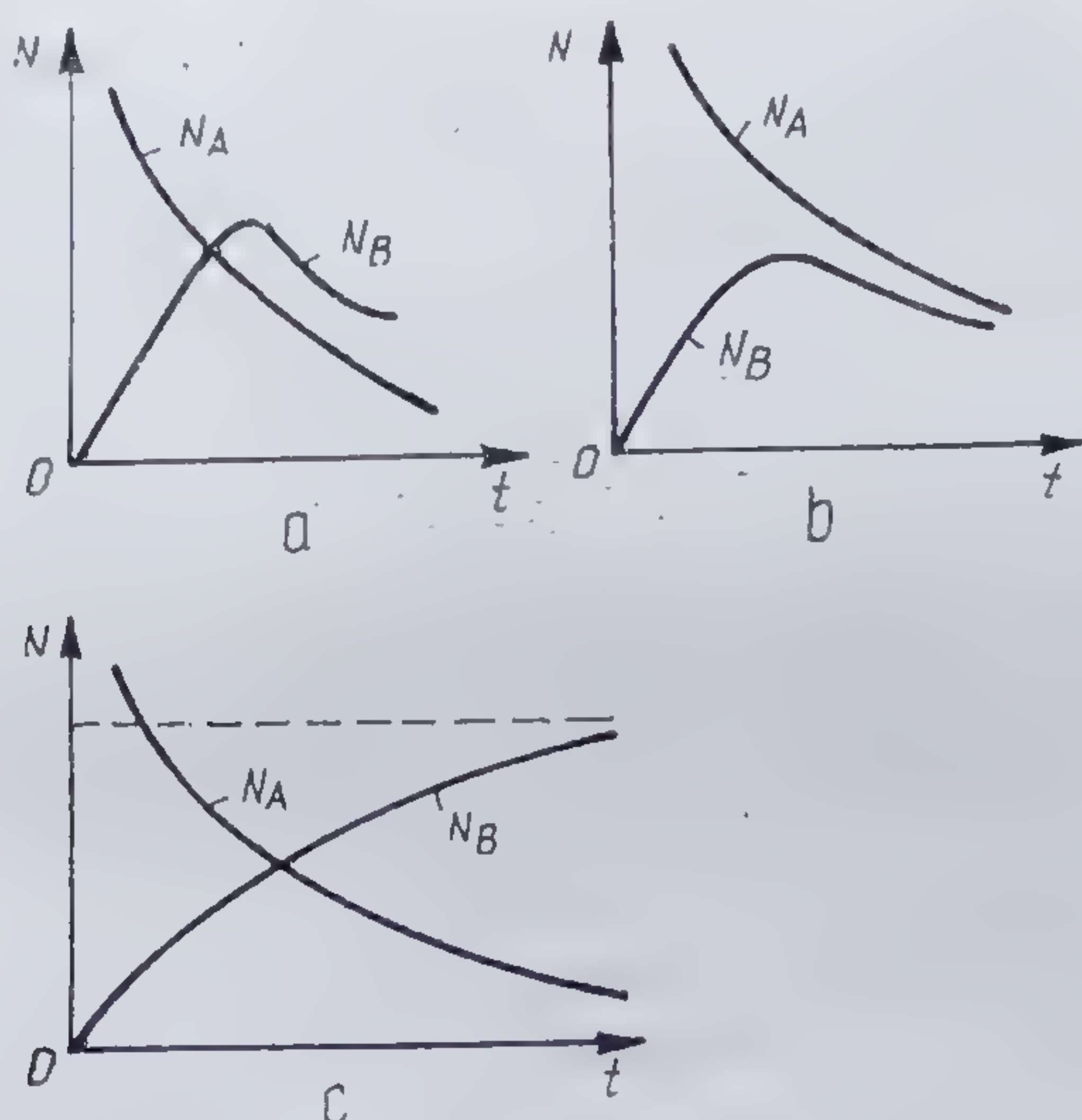


Fig. 12.5.1

b) $\lambda_B > \lambda_A$, astfel încât să avem $e^{-\lambda_A t} \gg e^{-\lambda_B t}$. Atunci, (12.5.11), devine

$$N_B(t) = N_A(0) \frac{\lambda_A}{\lambda_B - \lambda_A} e^{-\lambda_A t} = N_A(t) \frac{\lambda_A}{\lambda_B - \lambda_A}. \quad (12.5.14)$$

Se observă că în acest caz se stabilește un *echilibru de regim* în care raportul $N_A(t) / N_B(t) = \text{const.}$ (vezi fig. 12.5.1, b).

c) $\lambda_A \gg \lambda_B$, când în (12.5.11) se vor putea face aproximațiile

$$N_B(t) = \frac{\lambda_A}{\lambda_B - \lambda_A} N_A(0) e^{-\lambda_B t} [e^{(\lambda_B - \lambda_A)t} - 1] \simeq \frac{\lambda_A}{\lambda_B} N_A(0) = \text{const.} \quad (12.5.15)$$

În acest caz numărul de nuclee de tip B rămâne deci constant în timp, realizându-se un *echilibru radioactiv secular* (fig. 12.5.1, c), situație întâlnită în cazul radonului aflat în prezența radiului.

Generalizarea rezultatelor de mai sus pentru familii radioactive formate din mai mulți descendenți, în care $A \xrightarrow{\lambda_A} B \xrightarrow{\lambda_B} C \xrightarrow{\lambda_C} \dots \xrightarrow{\lambda_M} M$, se poate face relativ ușor. Se obțin soluții de forma

$$N_M(t) = N_A(0) [C_1 e^{-\lambda_B t} + C_2 e^{-\lambda_B t} + \dots + C_M e^{-\lambda_M t}] \quad (12.5.16)$$

în care

$$C_1 = \frac{\lambda_A}{\lambda_M - \lambda_A} \cdot \frac{\lambda_B}{\lambda_M - \lambda_B} \cdots \frac{\lambda_M}{\lambda_N - \lambda_A} \quad (12.5.17)$$

$$C_2 = \frac{\lambda_A}{\lambda_M - \lambda_B} \cdot \frac{\lambda_B}{\lambda_M - \lambda_B} \cdots \frac{\lambda_M}{\lambda_M - \lambda_B}.$$

Acest sistem de ecuații este cunoscut sub denumirea de „sistem Bateman”.

O problemă fundamentală a fizicii transmutațiilor radioactive o reprezintă studiul mecanismelor de producere a spectrelor de radiații α , β sau γ , precum și a caracteristicilor respectivelor spectre. Și din acest studiu se obțin informații interesante privitoare la nucleul atomic, respectiv la interacțiile care se manifestă la nivel nuclear și subnuclear.

1. **Dezintegrarea α** este specifică elementelor naturale grele, cu $Z \geq 82$, deși ar trebui să se producă numai la acele nuclee pentru care energia necesară desprinderii unor perechi de nucleoni, formate din câte doi protoni și doi neutroni, este mai mică decât energia de legătură a particulei α ($W_{leg} = 8,3$ MeV), situație întâlnită la nucleele cu $A = 135 \div 140$. La nucleele cu $A > 240$ încep să apară procesele de fisiune spontană (descoperite în anul 1940 de către Flerov și Petrjaci), care se desfășoară cu timpul de înjumătățire $T_{1/2}$ diferit de cel al dezintegrărilor α .

Cunoașterea maselor izotopice face posibilă determinarea cu mare precizie a energiei Q_α care însoțește un proces de dezintegrare α , deoarece

$$\frac{A}{Z}m = \frac{A-4}{Z-2}m + \frac{4}{2}m + \frac{Q_\alpha}{c^2} \quad (12.5.21)$$

Pe această cale s-a obținut că, în general, $Q_\alpha < 8,3$ MeV și că intervine o dependență a lui Q_α de A (fig. 12.5.2), în care pe lângă creșterea treptată a lui Q_α odată cu creșterea lui A se evidențiază și prezența mai multor maxime care determină porțiuni în care Q_α descrește odată cu creșterea lui A , iar pentru valori ale lui A cuprinse între 83 și 135, Q_α este negativ. Trebuie remarcat că cele două maxime principale din dependența $Q_\alpha(A)$ corespund numerelor de masă $A = 140$ și $A = 212$, în zonele în care Q_α scade situându-se samariul și gadoliniul, respectiv uraniul. În schimb, la izotopii poloniului se obține o variație cu un maxim, care corespunde la ^{212}Po .

Analiza acestor variații ne arată că cele două maxime sînt determinate de a 5-a pătură nucleară, care conține, împreună cu precedentele patru pături, un număr de 82 de stări populate cu protoni, respectiv cu neutroni.

Se știe că, în anul 1911, H. Geiger și J.M. Nuttall au obținut, pe cale experimentală, o relație care leagă constanta de dezintegrare radioactivă λ , de energia E_α a particulelor α emise prin dezintegrare. Ea are forma

$$\ln \lambda = A + B \ln E_\alpha \quad (12.5.22)$$

și s-a dovedit a fi piatra de încercare a teoriilor cuantice de mai târziu ale dezintegrării α . S-a văzut (§ 8.8.4) că aceste teorii au fost elaborate de către G. Gamov [88], E. V. Condon și R. W. Gurney [88] și se bazează pe efectul tunel. Împreună cu variantele mai recente [51, 114], ele descriu satis-

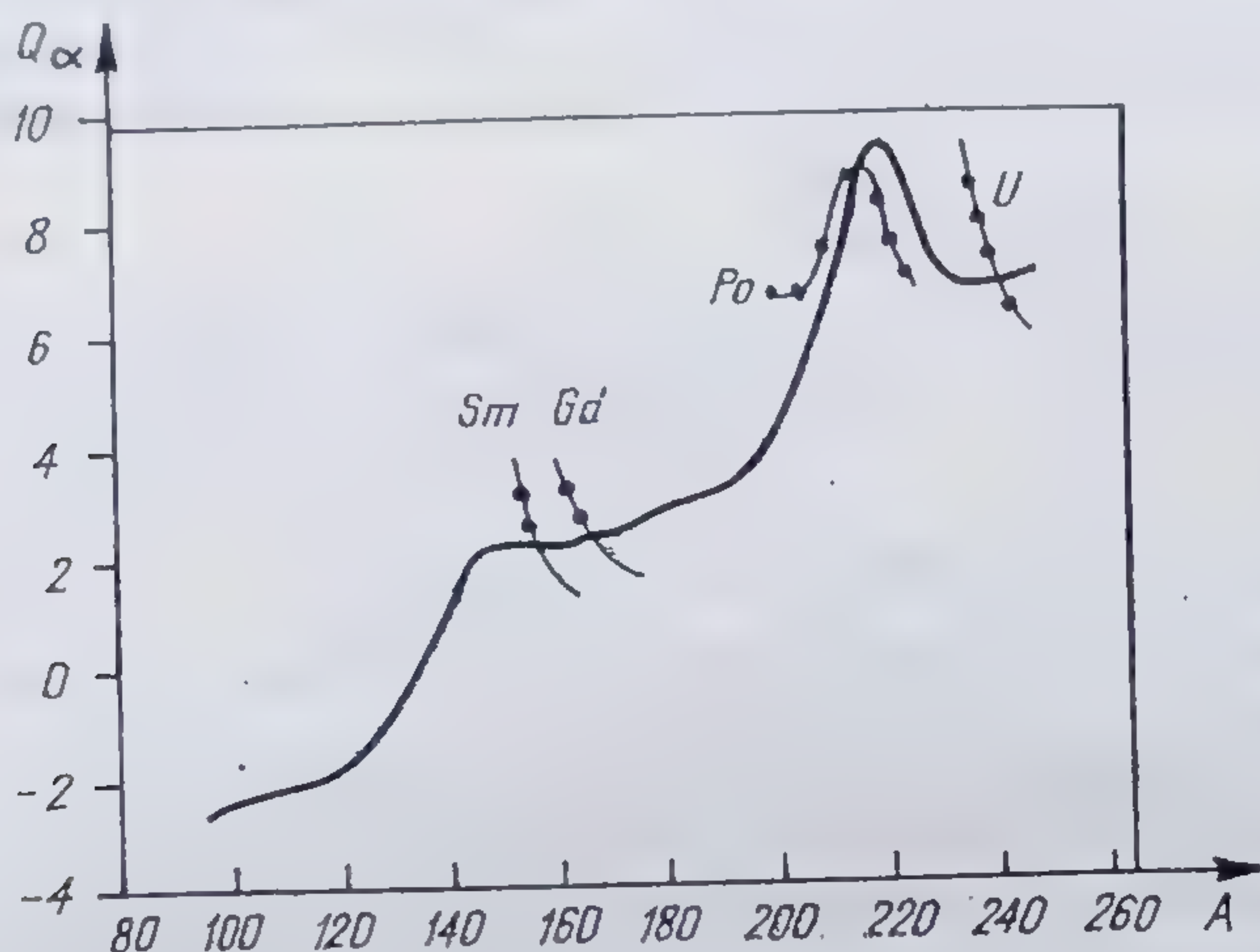


Fig. 12.5.2

făcător, calitativ și parțial cantitativ procesele de *dezintegrare* α a nucleelor atomice.

Astăzi este unanim acceptată ideea că emisia spontană de particule α din transmutațiile radioactive este determinată, în principal, de jocul statistic al interacțiilor de tip electromagnetic și respectiv al celor nucleare, care determină forma și înălțimea barierei de potențial ce urmează a fi tunelată de către particulele α care părăsesc nucleul.

De remarcă că teoria lui Gamov conține în rezultatul final (vezi (8.8.43)) numai o singură mărime nucleară și anume raza R a nucleului, calculabilă prin modelul în picătură. Modelul teoretic este însă destul de sensibil atât la modificarea formei interacției electromagnetice [114], cât și a celei nucleare [88] și pe aceste două căi s-au făcut încercări de îmbunătățire a teoriei. Au fost luate astfel în considerație mișcările de rotație ale nucleonilor superficiali din nucleu sau, mai general, starea lor cuantică din nucleu [114] cu scopul de a se obține și o explicație adecvată a curbei $Q_\alpha(A)$. Există, de asemenea, încercări interesante de a explica dezintegrarea α prin modele de fisiune asimetrică (în două fragmente diferite ($\frac{4}{2}\alpha$ și $\frac{A-4}{2}Y$) a nucleelor α -active [90]. Toate acestea demonstrează că studiul dezintegrărilor α este încă deschis unor perfecționări ulterioare.

2. **Dezintegrarea β** constă în transmutații radioactive ce se realizează între izobari (specii nucleare cu același A , dar cu Z diferiți) și sînt însoțite de emisia de electroni, în cazul dezintegrărilor β^- și de pozitroni în cazul celor β^+ . Se știe că primele tipuri de dezintegrări apar frecvent la elementele radioactive naturale grele, fiind procese ce se intercalează între două dezintegrări α . Există însă și excepții de la această regulă, una dintre aces-

tea fiind reprezentată de cazul izotopului $^{40}_{19}\text{K}$, care este β^- -activ. Dezintegrările β^+ apar numai la elemente radioactive artificiale.

S-a constatat experimental că dezintegrările de tip β sînt, ca și cele de tip α , însoțite și de emisia unor cuante de radiații γ , ceea ce înseamnă că transmutațiile radioactive conduc la nașterea unor nuclee în stări excitate, dezexcitarea făcîndu-se prin emisii de fotoni γ . De exemplu, în cazul $^{28}_{13}\text{Al}$ se obțin două tipuri de nuclee de $^{28}_{14}\text{Si}$, unul în stare fundamentală, iar

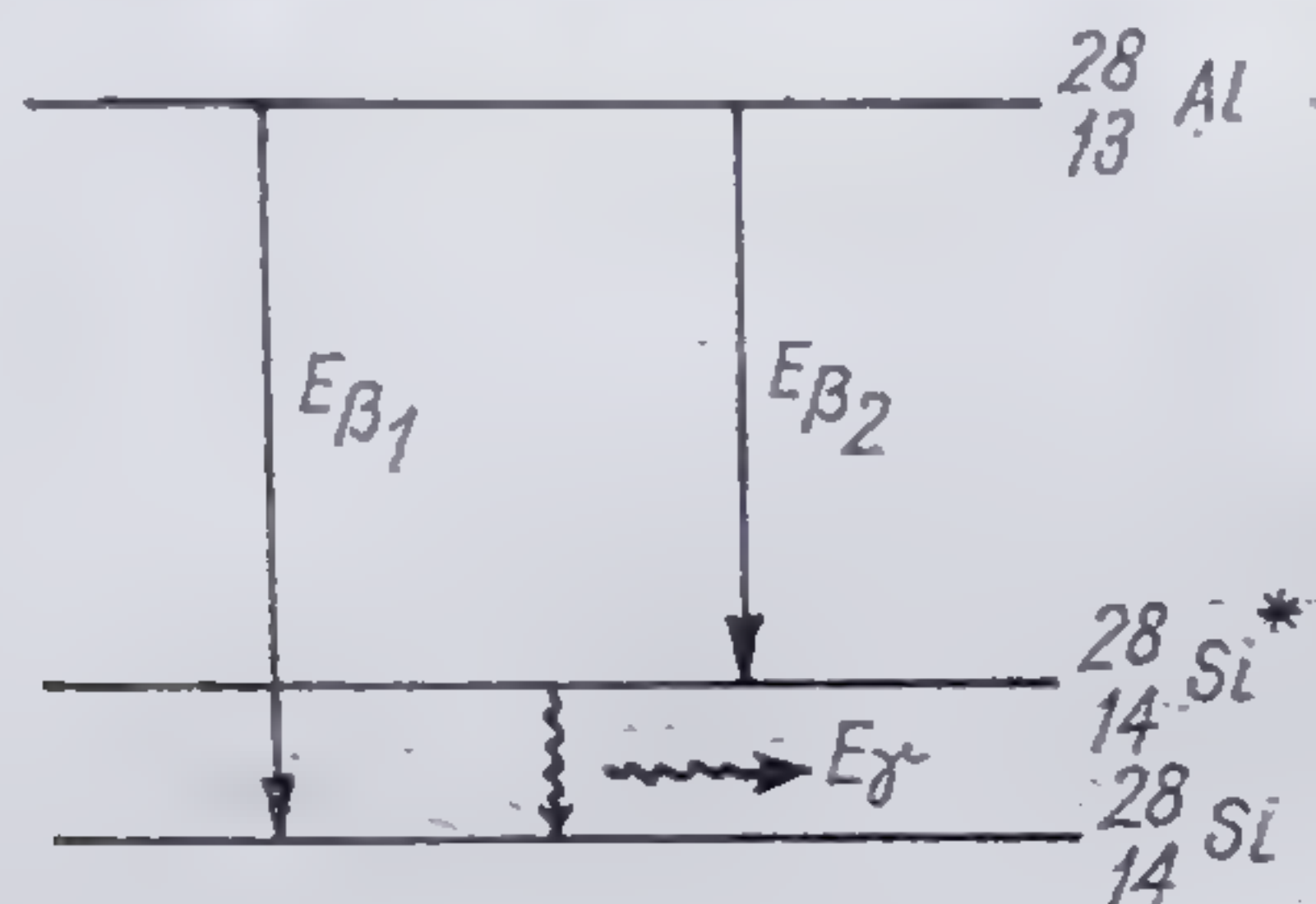


Fig. 12.5.3

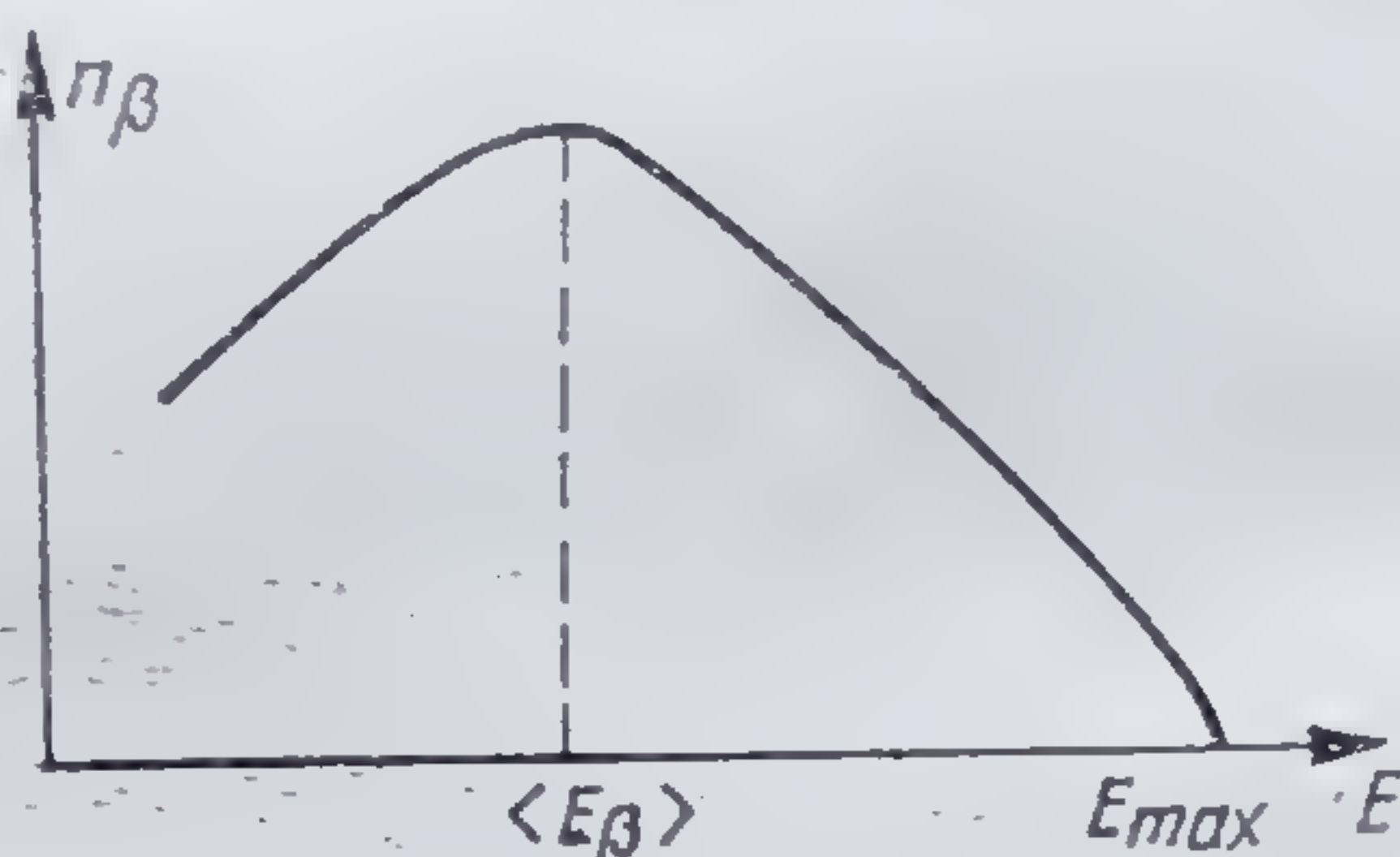


Fig. 12.5.4

celălalt (Si^*) în stare excitată, emițîndu-se un spectru β^- compus din două componente energetice (vezi fig. 12.5.3), una cu $E_{\beta_1} = 3,647 \text{ MeV}$, iar celaltă cu $E_{\beta_2} = 2,965 \text{ MeV}$, diferența $E_\gamma = E_{\beta_1} - E_{\beta_2} = 1,782 \text{ MeV}$ fiind tocmai energia cuantelor γ emise. Dar în cele mai multe cazuri spectrul β^\pm discret se suprapune peste un spectru continuu, care posedă un maxim (fig. 12.5.4) și o energie maximă E_{\max} .

Este necesar să menționăm că multă vreme în explicarea mecanismului de dezintegrare β^- s-au întîmpinat o serie de dificultăți. Acestea au fost determinate mai întîi de faptul că, pentru spectrul energetic continuu al radiațiilor β^- , maximul corespunde unei valori energetice medii $\langle E_\beta \rangle$, iar din bilanțul energetic al proceselor de dezintegrare β , adică din

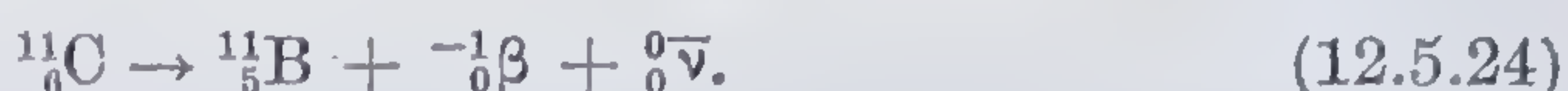
$$^A_Z m \rightarrow ^A_{Z\pm 1} m + ^0_{\mp 1} \beta + \frac{Q_\beta}{c^2} \quad (12.5.23)$$

rezultă că în cadrul fiecărui act elementar de dezintegrare se eliberează o energie egală cu E_{\max} (fig. 12.5.4). După ce s-a constatat că o parte dintre electronii emiși în timpul dezintegrărilor β^- sînt *electroni de conversie*, proveniți din păturile electronice ale atomului (pe care radiația γ , ce însoțește aceste dezintegrări, îi expulzează prin efect fotoelectric) s-a ajuns la concluzia certă că fiecare electron, respectiv fiecare pozitron produs prin dezintegrare β trebuie să posede o energie E_β riguros egală cu E_{\max} . De ce unele dintre particulele β au energia mai mică decît E_{\max} a rămas pentru cîtva timp o mare enigmă, pe care însuși Niels Bohr a încercat s-o rezolve prin renunțarea la legea conservării energiei.

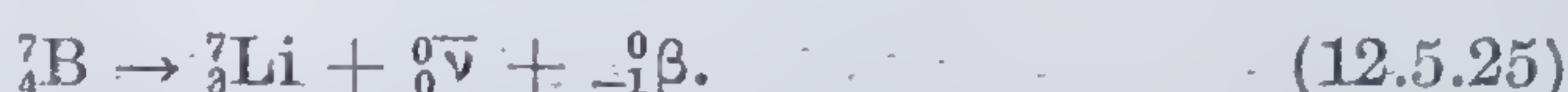
În anul 1930, W. Pauli formulează *ipoteza neutrinelui*, potrivit căreia într-un proces elementar de dezintegrare β se emit nu una, ci două particule și anume un electron (respectiv un pozitron) și un antineutrino $\bar{\nu}^0$

(respectiv un neutrino ${}^0\nu$) — particule cu spin $1/2$ (deci fermioni) care își împart între ele atât impulsul, cât și energia rezultată din dezintegrare. În felul acesta poate interveni o distribuție continuă atât a energiei cât și a impulsului radiațiilor emise în procesele radioactive [121].

Existența neutrino a fost dovedită prin experiențe extrem de delicate, începute de A. I. Leipunski [113] în anul 1936, în care se măsura reculul nucleului de bor rezultat din dezintegrarea

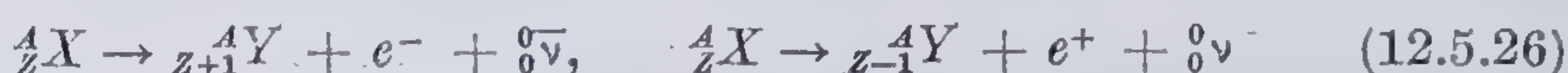


În anul 1942, J. G. Allen [113] a început să măsoare cu mare precizie reculul celui mai ușor nucleu ce se obține prin captură K și anume cel de ${}^7_3\text{Li}$, recul ce nu poate fi determinat decât de prezența neutrino, întrucât un astfel de proces se desfășoară după schema

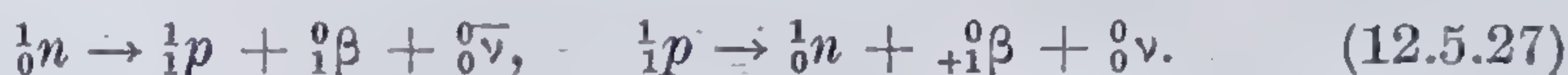


A putut fi pusă în evidență astfel, prezența unei particule care manifestă interacția cea mai slabă cu alte particule (o ciocnire la numărul de particule pe care le întâlnește de-a lungul axei polilor terestri!).

Pe baza existenței neutrino a fost creată teoria dezintegrării β , în anul 1934, de către Enrico Fermi, în ipoteza $m_\nu = 0$. În această teorie se admite că procesele de dezintegrare β constau în tranziții nucleare, de forma



în care, deci, nucleonul trece din starea de neutron în starea de proton și invers, potrivit următoarelor scheme



În § 12.2 s-a văzut că astfel de tranziții intervin între stările izobare și că ele conduc la realizarea unui nucleu stabil, cu $Z_0 \simeq \frac{A}{2}$

De notat că tranzițiile de tipul (12.5.27), în care intervine o schimbare a naturii particulelor, sînt studiate de *electrodinamica cuantică*. În acest scop se folosește noțiunea de probabilitate de tranziție, definită în § 10.5, prin expresia (10.5.2).

Astfel, dacă E_β și E_ν sînt energiile cinetice relativiste ale unei particule β , respectiv ale unui neutrino, emiși într-un proces de dezintegrare β , iar

$$E_{max} = E_\beta + E_\nu = c\sqrt{p_\beta^2 + m_e^4c^4} - m_e c^2 + E_\nu \quad (12.5.28)$$

atunci condiția ca într-o astfel de dezintegrare să se conserve și impulsul partenerilor de proces va fi cuprinsă în teorie prin utilizarea funcției $\delta(E_{max} - E_\beta - E_\nu)$, a lui Dirac. Expresia probabilității de tranziție $W_{i \rightarrow f}$ (din starea inițială „ i ” în starea finală „ f ”) va fi în acest caz de forma (vezi și § 10.5)

$$W_{if} = \frac{2\pi}{h} \langle |H'|^2 \rangle \delta(E_{max} - E_\beta - E_\nu) \quad (12.5.29)$$

Probabilitatea de realizare a unor tranziții β în stări cu impulsurile p_β și p_ν , distribuite omogen și izotrop, în intervalele p_β ; $p_\beta + dp_\beta$ și p_ν ; $p_\nu + dp_\nu$ va fi dată de expresia

$$dW_{i \rightarrow f} = \frac{32\pi^3}{h} \langle |\hat{H}'^2| \rangle \delta(E_{max} - E_\beta - E_\nu) \quad (12.5.30)$$

în care s-a luat $\Delta\Omega_{p_\beta} \cdot \Delta\Omega_{p_\nu} = 16\pi^2$ (vezi și § 10.4). Înseamnă că dintr-un număr n_0 de dezintegrări β , numărul $dn_\beta = n_0 dW_{i \rightarrow f}$, vor avea impulsul p_β cuprins în intervalul dp_β . Pentru acest număr se obține expresia

$$dn_\beta = \frac{32\pi^3 n_0}{h} \langle |H'_{i \rightarrow f}|^2 \rangle p_\beta^2 dp_\beta \int \delta(E_{max} - E_\beta - E_\nu) p_\nu^2 dp_\nu. \quad (12.5.31)$$

De observat însă că în aproximația în care masa proprie a neutrinelui se ia nulă ($m_\nu \simeq 0$) și deci cînd $E_\nu = cp_\nu$, prin folosirea următoarei proprietăți a funcției δ a lui Dirac (vezi Anexa 3)

$$\int f(x) \delta(x - x_0) dx = f(x_0) \quad (12.5.32)$$

putem scrie

$$\begin{aligned} \int \delta(E_{max} - E_\beta - E_\nu) p_\nu^2 dp_\nu &= \frac{1}{c^3} \int E_\nu^2 \delta(E_{max} - E_\beta - E_\nu) dE_\nu = \\ &= \frac{1}{c^3} (E_{max} - E_\beta)^2. \end{aligned} \quad (12.5.33)$$

Luînd în continuare

$$E_\beta = c \sqrt{p_\beta^2 + m_e c^2} - m_e c^2 \quad (12.5.34)$$

prin cîteva transformări simple rezultă

$$p_\beta^2 dp_\beta = (E_\beta + m_e c^2) \sqrt{E_\beta(E_\beta + 2m_e c^2)} dE_\beta$$

astfel încît expresia (12.5.31) primește forma

$$dn_\beta = \frac{32\pi^3 n_0}{h c^3} \langle |H'_{i \rightarrow f}|^2 \rangle (E_{max} - E_\beta)^2 (E_\beta + m_e c^2) \sqrt{E_\beta(E_\beta + 2m_e c^2)} dE_\beta. \quad (12.5.35)$$

Pe baza acestui rezultat se poate calcula constanta de dezintegrare radioactivă λ , întrucît așa cum s-a văzut mai sus

$$\lambda = \frac{\ln 2}{T_{1/2}} = \frac{1}{n_0} \int_0^{E_{max}} dn_\beta. \quad (12.5.36)$$

În cazul în care momentele de tranziție $\langle |H'_{i \rightarrow f}|^2 \rangle$ nu depind puternic de energia E_β (caz ce corespunde bine realității) se va putea scrie

$$\frac{\ln 2}{T_{1/2}} = \frac{32\pi^3}{\hbar c^3} \cdot \langle |H'_{i \rightarrow f}|^2 \rangle \int_0^{E_{max}} (E_{max} - E_\beta) (E_\beta + m_e c^2) \sqrt{E_\beta (E_\beta + 2m_e c^2)} dE_\beta. \quad (12.5.37)$$

Integrala -

$$I(E_{max}, Z) = \int_0^{E_{max}} \sqrt{E_\beta (E_\beta + 2m_e c^2)} (E_{max} - E_\beta) (E_\beta + m_e c^2) dE_\beta \quad (12.5.38)$$

care intervine în expresia (12.5.37) este destul de complicată și de greu de calculat. Dacă însă se poate face aproximația $E_{max} \gg m_e c^2 = 0,5 \text{ MeV}$ atunci ea se va reduce la forma

$$I(E_{max}, Z) \simeq \int_0^{E_{max}} (E_{max} - E_\beta)^2 E_\beta^2 dE_\beta = \frac{2}{15} E_{max}^5 \quad (12.5.39)$$

și deci

$$\frac{\ln 2}{T_{1/2}} = \frac{64\pi^3}{15\hbar c^3} \langle |H'_{i \rightarrow f}|^2 \rangle E_{max}^5 \quad (12.5.40)$$

rezultat care confirmă o așa zisă „regulă Nordheim” potrivit căreia timpul de înjumătățire $T_{1/2}$ al unui nuclid β -activ este cu atât mai mare cu cât energia maximă a spectrului β emis este mai mică.

Pentru cazul general, din (12.5.37) rezultă

$$T_{1/2} \cdot I(E_{max}, Z) = \frac{\hbar c^3 \ln 2}{32\pi^3 \langle |H'_{i \rightarrow f}|^2 \rangle} \quad (12.5.41)$$

Se observă că produsul $T_{1/2} \cdot I(E_{max}, Z)$ este determinat de momentul de tranziție $\langle |H'_{i \rightarrow f}|^2 \rangle$. Experimental se constată că intervin valori mult diferite între ele pentru acest produs și, de aceea, pentru caracterizarea dezintegrărilor β , se ia $\log(I \cdot T_{1/2})$. Funcție de valorile acestui număr, dezintegrările β se împart în *dezintegrări permise* și *dezintegrări interzise*. Se numesc permise tranzițiile cu $l = 0$, pentru care $\log(I \cdot T_{1/2}) \simeq 3 \div 5$ și se numesc interzise tranzițiile cu $l = 1, 2, \dots$ (valoarea lui l determină și ordinul respectivei dezintegrări interzise) pentru care $\log(I \cdot T_{1/2})$ crește extrem de mult ca urmare a scăderii pronunțate a momentelor $\langle |H'_{i \rightarrow f}|^2 \rangle$, ($\log I \cdot T_{1/2} = 9; 15; 18$; pentru $l = 1, 2, 3$ etc.).

Se observă, din cele de mai sus, că momentele de tranziție sînt determinate de operatorul de perturbație \hat{H}' . Acesta va descrie, desigur, interacția care intervine și condiționează tranzițiile β . Caracteristicile unor astfel de interacții s-au dovedit a fi similare, în multe privințe, interacțiilor

de tip electromagnetic, dar ele au o rază de acțiune de numai 10^{-16} m și o intensitate de 10^{28} ori mai slabă decât a interacțiilor electromagnetice. Din această pricină au fost denumite *interacții slabe*. S-a constatat că și interacțiile slabe se realizează prin schimb de bosoni, aceștia primind numele de *bosoni intermediari* W^{\pm} (vezi și § 12.10.5).

Interacțiile slabe sînt specifice particulelor ușoare, denumite *leptoni* (vezi § 12.10). Ele sînt însoțite întotdeauna de prezența neutrinelor. De observat că întrucît intervine o *lege de conservare a numărului de leptoni*, se vor genera neutrini și în procesele cunoscute sub denumirea de *captură K*, descoperite în anul 1938 de către Alvarez; acestea constau în captarea de către nucleu a unor electroni atomici de pe păturile *K*, deci în dispariția unui lepton, care va trebui să fie compensată de generarea altui lepton, conform schemei



Prin urmare și captura *K* (și în general toate procesele de captură electronică) poate oferi informații prețioase asupra interacțiilor slabe. S-a constatat, de exemplu, că o captură electronică este însoțită de emisia unor spectre de radiații *X* caracteristice (determinate de rearanjarea celorlalți electroni atomici), iar uneori chiar de expulzarea din atom a unor electroni, denumiți *electroni Auger* (fenomen descoperit de Auger în anul 1946). Captura *K* poate interveni și la nucleele ușoare, în care caz oferă, așa cum s-a văzut mai sus, posibilitatea determinării energiei neutrinelor, prin măsurarea efectelor de recul.

În sfîrșit, mai trebuie menționat că interacția slabă s-a dovedit a fi o interacție care *violează principiul conservării parității*. Acest fapt a fost demonstrat de C. S. Wu în anul 1957, pe baza lucrărilor teoretice ale lui T. D. Lee și C. N. Yang, elaborate cu un an mai înainte (premiul Nobel, 1957). Se știe că principiul conservării parității cere ca în toate tranzițiile la care participă nucleul, funcția de undă să-și conserve caracterul de a fi pară sau impară, caracter determinat, așa cum s-a văzut în § 10.2, de numărul cuantic orbital *l*. Această cerință conduce implicit la existența unor simetrii de oglindire, la nivel cuantic, în care „dreapta” este echivalentă cu „stînga”, simetrie care desigur nu există și la nivel macroscopic. Dar, potrivit acestei simetrii procesele nucleare trebuie să se desfășoare în conformitate cu cerința de conservare a parității, adică imaginea în oglindă a procesului trebuie să fie identică cu procesul însuși. S-a constatat însă că în cazul nucleelor de ${}^{60}\text{Co}$, aflate într-un cîmp magnetic de inducție *B* ridicată și la temperaturi scăzute ($T \leq 0,01$ K), emisia radiațiilor β^- se face în mod preferențial (cu 40 % mai mult în direcția și în sensul lui *B*; fig. 12.5.5). În acest caz însă, imaginea în oglinda *O* a procesului de dezintegrare β^- nu mai este identică cu obiectul (ci inversată, momentul magnetic nuclear $\langle \mu_z \rangle$ schimbîndu-și semnul) și prin urmare paritatea nu se mai conservă.

De neconservarea parității în procesele condiționate de interacția slabă, la care participă neutrinii, este legată problema masei proprii a acestor particule. O primă rezolvare a acestei probleme s-a făcut în ipoteza

că $m_\nu = 0$ (L. Landau, T. Lee, N. Yang, A. Salam), dar că există două tipuri de neutrini : ν și $\bar{\nu}$ (ultima fiind antiparticula primei), ambele avînd spinul $1/2$, la neutrin acest spin fiind orientat paralel și în sensul mișcării, iar la antineutrini spinul este orientat în sens invers mișcării.

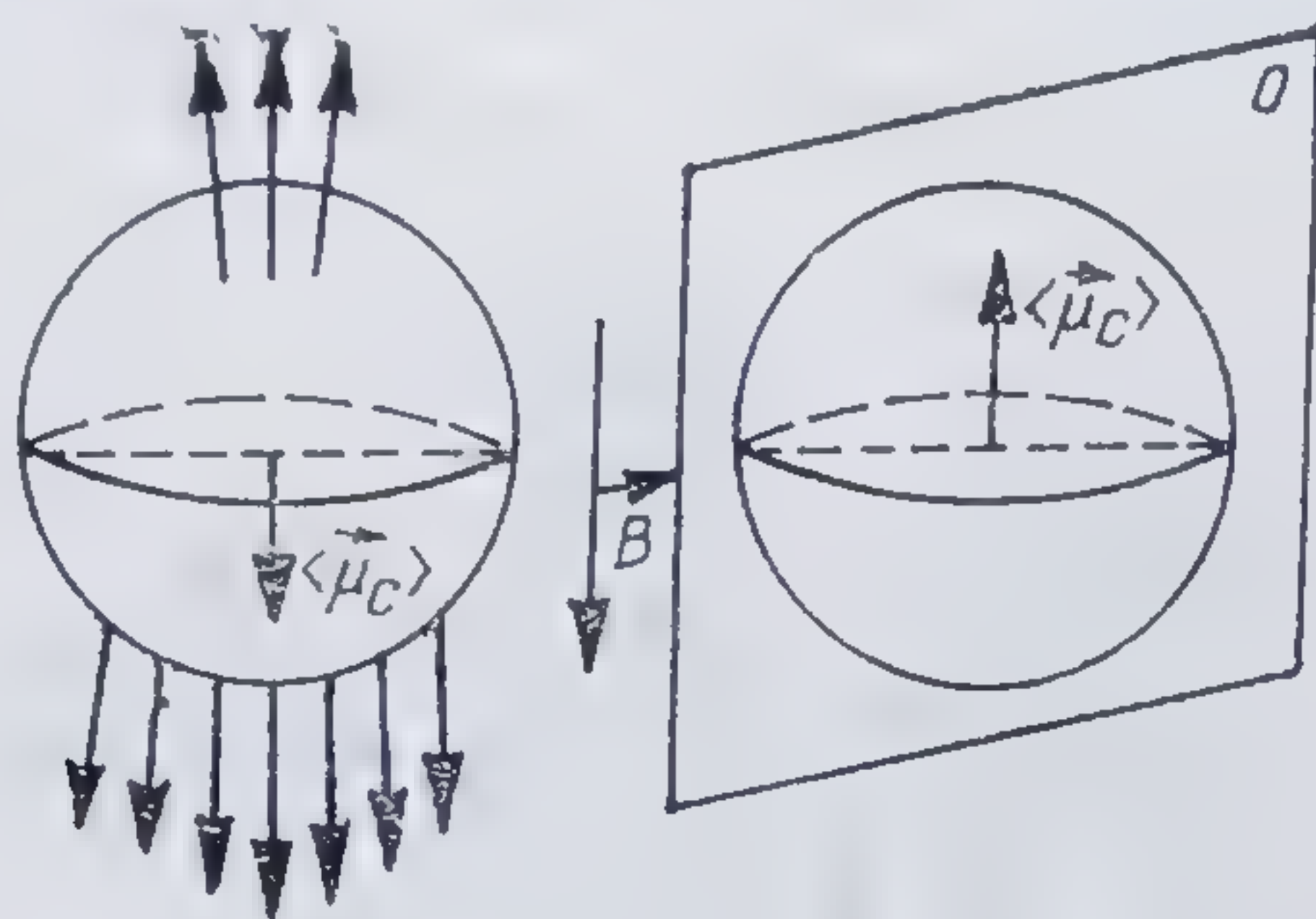


Fig. 12.5.5

După ce s-a constatat că și mezonii μ^\pm participă la interacțiunile slabe, prin procese de dezintegrare de forma

$$\mu^+ \rightarrow e^+ + \nu_e + \bar{\nu}_\mu; \quad \mu^- \rightarrow e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu \quad (12.5.43)$$

s-a ajuns la concluzia că de fapt există patru tipuri de neutrini și anume perechea de *neutrini electronici* (ν_e și $\bar{\nu}_e$) și perechea de *neutrini miuonici* (ν_μ , $\bar{\nu}_\mu$). Teoriile asupra interacțiilor slabe au fost dezvoltate și în acest nou cadru, în diverse variante, cea mai cunoscută fiind *teoria calibrării* (gauge), (vezi § 12.10), elaborată în anul 1967 de către S. Glashow, G. Weinberg și A. Salam (premiul Nobel, 1978). Rămîn însă și aici deschise o serie de probleme legate pe de o parte de masa de repaus a neutrinilor, iar pe de altă parte, de caracteristicile forțelor de interacție slabă.

3. Emisia radiației γ . S-a văzut mai sus că transmutațiile radioactive α și β sînt însoțite de emisia altor tipuri de radiații (radiații X caracteristice, electroni de conversie, electroni Auger), cea mai importantă dintre acestea fiind radiația γ , formată din fotoni de radiație electromagnetică, cu lungimi de undă $\lambda \in (2 \div 5) \cdot 10^{-2} \text{\AA}$. Spectrul energetic al acestei radiații este un spectru discret, format din cîteva linii corespunzătoare tranzițiilor izomere ale nucleului din stările excitate în starea fundamentală. În fig. 12.5.6 este prezentat un astfel de spectru, pentru cazul $^{226}_{88}\text{Ra}$. El se poate obține prin mai multe metode, cele mai importante fiind: determinarea efectelor de recul ale electronilor emiși prin conversie internă; efectul produs de radiația γ asupra cristalelor de NaI, activate cu Tl , sau asupra celor de Ge(Li) și folosirea efectului de fotomultiplicare; studiul reacțiilor fotonucleare, de tipul $^2_1d + ^0_0\gamma \rightarrow ^1_1p + ^1_0n$; difracția radiațiilor γ pe rețele cristaline, fenomen similar difracției radiațiilor X etc.

Pe baza rezultatelor experimentale înregistrate s-au putut stabili cu mare precizie caracteristicile radiațiilor γ și ale proceselor la care ele

pot să participe. În același timp s-a putut elabora teoria tranzițiilor γ (W. Heitler) pe baza unei tratări în care se evaluează atât emisiile de dipol electric, cvadrupol, octupol ș.a.m.d., cât și emisia de dipol magnetic ale radiațiilor electromagnetice. Apartenența cuantelor γ la un anumit tip de emisie se numește *multipolaritate*. Tranzițiile pot fi descrise prin momentele de tranziție $\langle |H'_{if}| \rangle$ în care interacția \hat{H}' este de tip electromagnetic.

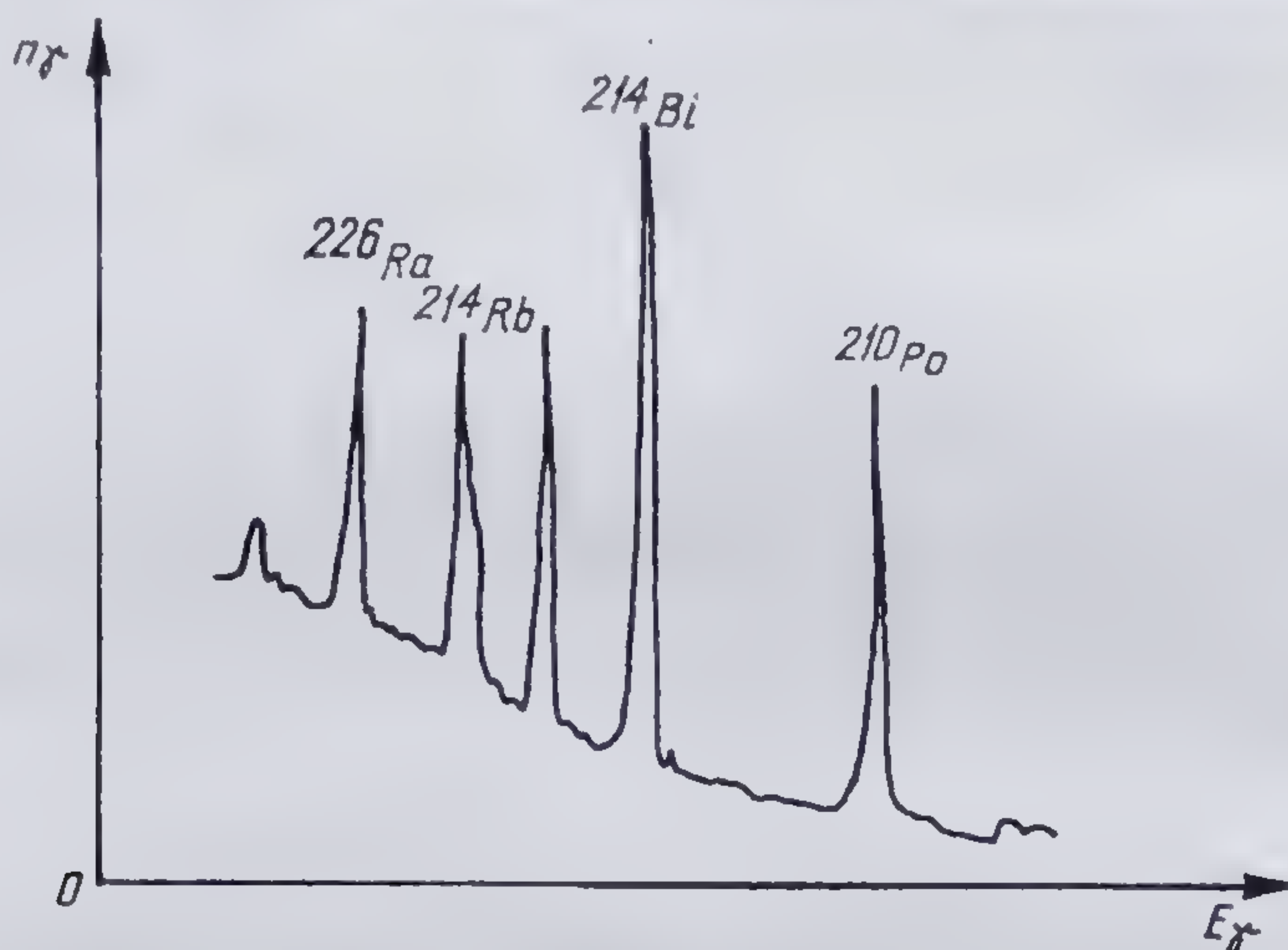


Fig. 12.5.6

Intervin desigur și în aceste tranziții reguli de selecție care, potrivit teoriei lui Weisskopf [109], sînt determinate de numerele cuantice orbital l și se spin I , fiind de forma

$$|I_i + I_f| \geq l \geq |I_i - I_f| \quad (12.5.44)$$

și $W_{if} \sim (-1)^l$ — pentru tranziții multipolar electrice,

$W_{if} \sim (-1)^{l+1}$ — pentru tranziții multipolar magnetice.

În anul 1921, O. Hahn constată că există și tranziții puternic interzise, care conduc la existența *izomerilor*, specii de nuclizi cu același A și Z , dar cu timpi de viață τ diferiți.

Urmînd un procedeu de calcul similar celui expus pentru cazul dezintegrării β s-a ajuns la concluzia că pentru cele două tipuri de dezintegrări, cu emisii de fotoni γ cu multipolaritate electrică, respectiv magnetică, constantele de dezintegrare sînt de forma

$$\lambda_\gamma \sim E_\gamma^{2l+1} \cdot R^{2l} \text{ și } \lambda_\gamma \sim E_\gamma^{2l+1} \cdot R^{2(l-1)} \quad (12.5.45)$$

R fiind raza nucleului

De notat de asemenea că pot interveni și procese de emisie în cascadă ale cuantelor γ , așa cum este schițat în figura 12.5.7. Se emit de regulă

două cuante, γ_1 și γ_2 , de energii diferite. Există însă o anumită dependență unghiulară a emisiei celor două cuante, care, odată pusă în evidență și măsurată, oferă posibilități de calcul al momentelor nucleare magnetice în stările excitate.

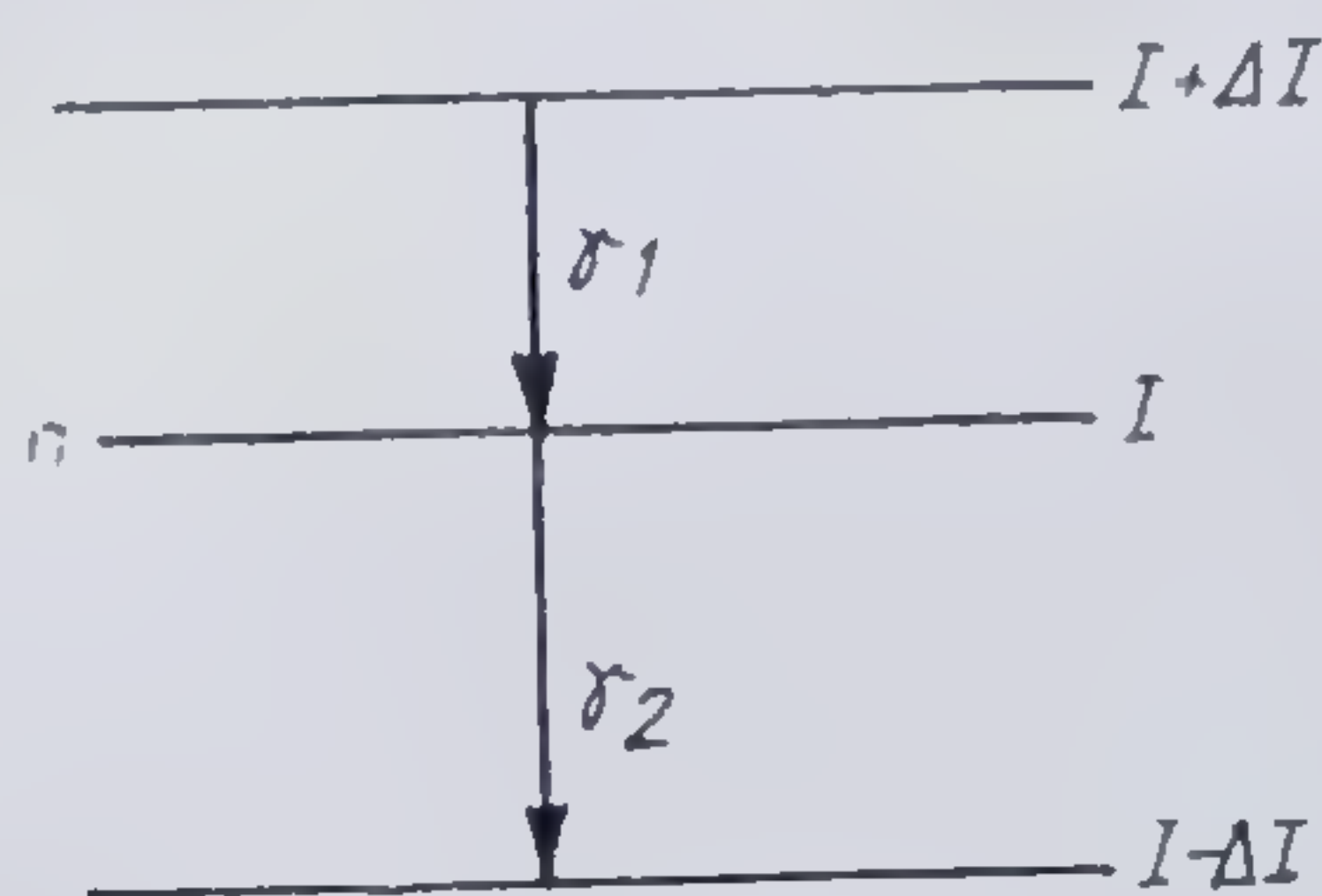
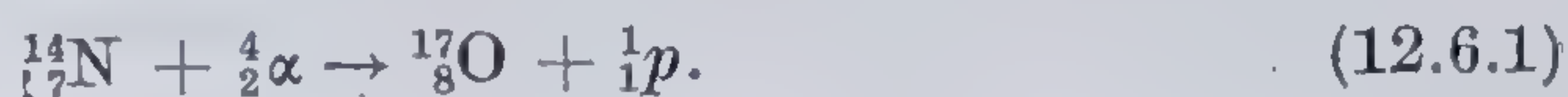


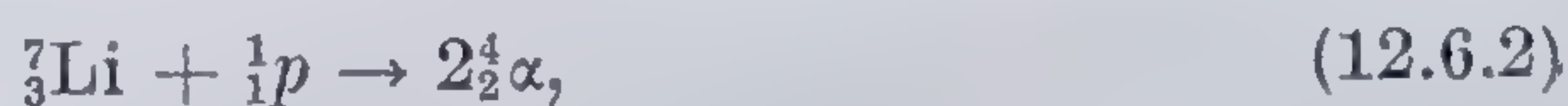
Fig. 12.5.7

§ 12.6. REACȚII NUCLEARE

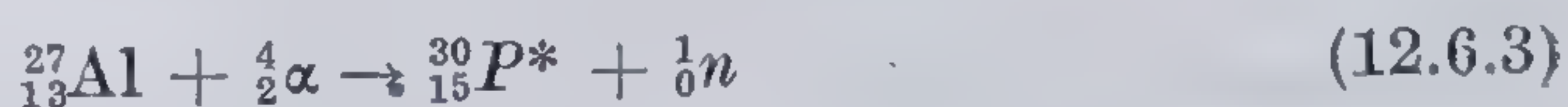
Rutherford a fost primul care a reușit să demonstreze că o transmutație nucleară poate fi realizată și pe cale forțată — proces care a primit denumirea de *reacție nucleară*. El obține, în anul 1919, protoni prin bombardarea nucleelor de azot cu particule α rezultate dintr-un preparat radioactiv natural, reacția desfășurându-se după schema :



La scurt interval de timp a fost realizată și prima reacție nucleară cu protoni accelerați, în care nucleul de ${}_{3}^{7}\text{Li}$ se descompune în două particule α , după schema



iar în anul 1934 Irène și Frédéric Joliot-Curie, din reacția



obțin nuclee de fosfor ${}_{15}^{30}\text{P}^*$, β^+ -active, descoperind astfel *radioactivitatea artificială*.

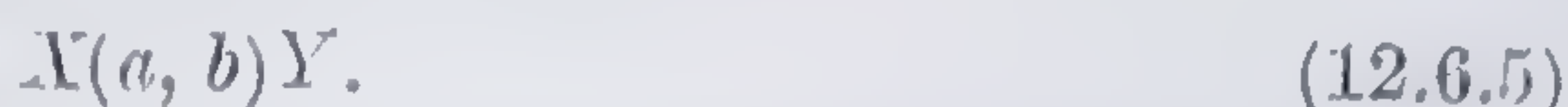
În felul acesta, interesul pentru studiul reacțiilor nucleare a crescut în mod vertiginos, numărul reacțiilor nucleare realizate și studiate în amănunțime fiind astăzi foarte mare. Unele dintre aceste reacții s-au dovedit a fi extrem de utile în studiul nucleului atomic și al particulelor elementare, iar altele ca surse de izotopi radioactivi artificiali sau chiar ca surse de energie (reacțiile de fisiune și de fuziune nucleară).

Printr-o reacție nucleară se înțelege, deci, procesul de tranziție forțată a unui nucleu ${}_Z^AX$ — denumit *nucleu țintă* — sub acțiunea unei particule

a — denumită *particulă proiectil* — tranziție care conduce la formarea unui alt nucleu ${}_Z^A Y$ — numit *nucleu produs* și la o altă particulă b . Un astfel de proces se poate exprima prin schema



sau concis



În sens mai general, prin reacție nucleară se înțelege procesul ce se declanșează în urma ciocnirii a două microparticule (o particulă cu un nucleu, două particule între ele sau chiar două nuclee între ele) și la care *participă interacțiunile tari*. S-a constatat că desfășurarea unor astfel de procese depinde în mod esențial de energiile cinetice pe care le au participanții la reacție înainte de ciocnire, precum și de tipul acestora. Astfel, o reacție nucleară se desfășoară după o schemă simplă, de forma (12.6.4), numai la energii de ordinul a câtorva megaelectron-volți (cît este de fapt energia medie de legătură pe nucleon). La energii mult mai mari intervin scheme de reacție mai complexe din care rezultă nu două, ci mai multe microparticule, ale căror direcții de zbor și caracteristici satisfac o serie de reguli — cunoscute sub denumirea de *legi ale reacțiilor nucleare*.

1. *Legile reacțiilor nucleare sînt legi de conservare, specifice interacțiilor tari și anume:*

a) *legea conservării numărului de sarcini electrice elementare, exprimată prin egalitatea*

$$Z_1 + Z = Z' + Z_2; \quad (12.6.6)$$

b) *legea conservării numărului de sarcini barionice, respectiv a numărului de masă A , exprimată prin egalitatea*

$$A_1 + A = A' + A_2; \quad (12.6.7)$$

c) *legea conservării energiei relativiste a participanților la reacție, exprimată prin egalitatea*

$$E_a + E_X = E_Y + E_b \quad (12.6.8)$$

în care, potrivit relației (3.6.14), prin E s-a desemnat energia totală a microparticulei, formată din energia ei cinetică T și din energia ei de repaus $m_0 c^2$, adică

$$E = T + m_0 c^2. \quad (12.6.9)$$

Cu (12.6.9), expresia (12.6.8) se poate scrie sub forma

$$T_a + m_a c^2 + T_X + m_X c^2 = T_Y + m_Y c^2 + T_b + m_b c^2. \quad (12.6.10)$$

Pentru nuclee țintă fixe ($T_X = 0$), folosind notația

$$Q = (m_a + m_X - m_Y - m_b) c^2 \quad (12.6.11)$$

obținem următoarea lege de conservare a energiei

$$T_a + Q = T_Y + T_b. \quad (12.6.12)$$

Mărimea Q , definită prin relația (12.6.11), este denumită *energie de reacție*, întrucât ea poate fi degajată ($Q > 0$) sau absorbită ($Q < 0$) în respectiva reacție nucleară.

Reacțiile în care se degajă energie ($Q > 0$) se numesc *exoenergetice*, iar cele în care se absoarbe energie ($Q < 0$) sînt reacții *endoenergetice*. Reacțiile pentru care $Q = 0$ se reduc la simple împrăstieri elastice.

De notat că reacțiile endoenergetice pot fi declanșate numai de particule proiectil care posedă o anumită energie cinetică minimă, numită *energie de prag* ($T_{a\min} = E_p$). Energia de prag E_p este mai mare decît $|Q|$, deoarece o parte din această energie este preluată sub formă de recul de către nucleul țintă ciocnit neelastic de particula proiectil. Atunci :

$$m_a v_a = (m_X + m_a) v_X \quad (12.6.13)$$

și deci

$$T_a \geq |Q| + \frac{1}{2}(m_X + m_a) v_X^2 = E_p. \quad (12.6.14)$$

Din aceste două relații rezultă

$$E_p = |Q| \left(1 + \frac{m_a}{m_X} \right). \quad (12.6.15)$$

d) *Legea conservării impulsului*. Pentru un nucleu țintă fix (fig. 12.6.1) această lege se va scrie sub forma

$$\mathbf{p}_a = \mathbf{p}_Y + \mathbf{p}_b \quad (12.6.16)$$

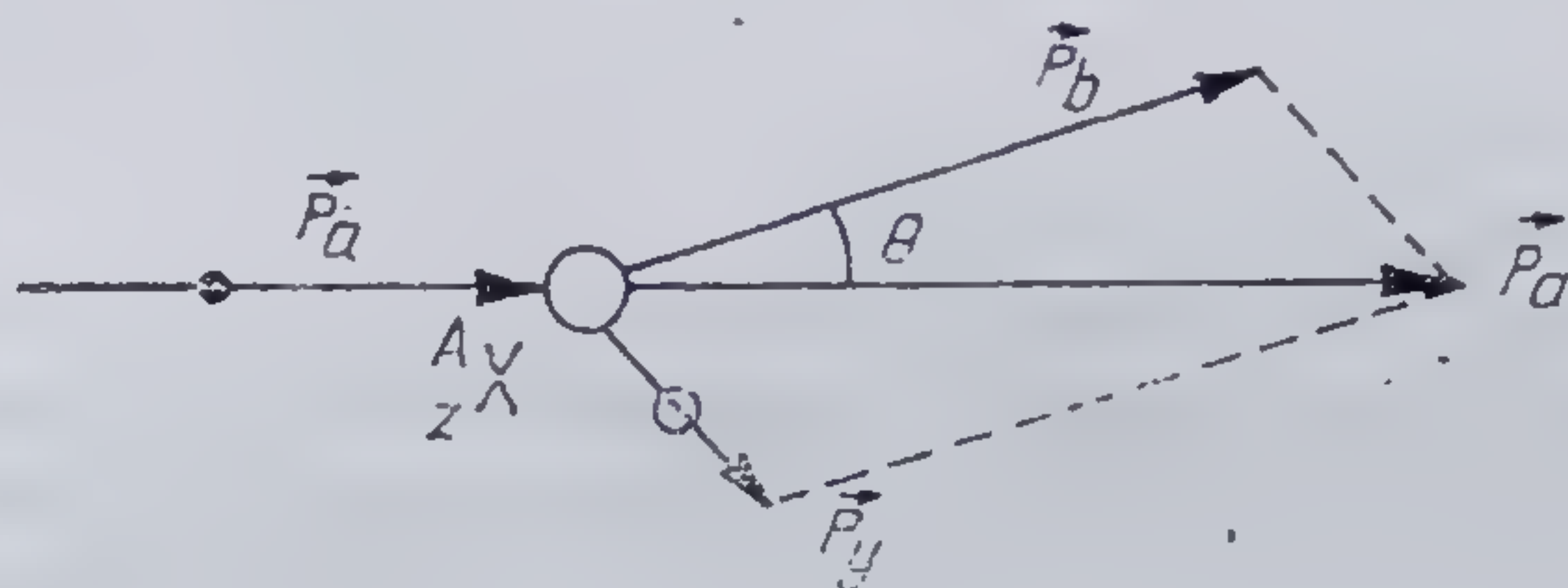


Fig. 12.6.1

respectiv scalar

$$p_Y^2 = p_a^2 + p_b^2 - 2p_a p_b \cos \theta. \quad (12.6.17)$$

Folosind aici expresia nerelativistă a energiei cinetice $T = p^2/2m_0$, expresie valabilă pentru energii nu prea mari și ținînd cont că $m = A \cdot u$, ($1 u = 1,57 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$) se obține :

$$A_Y T_Y = A_a T_a + A_b T_b - 2\sqrt{A_a A_b T_a T_b} \cos \theta. \quad (12.6.18)$$

În general este dificilă determinarea directă a energiei cinetice T_Y a nucleului produs și, de aceea, folosind expresia (12.6.17) împreună cu (12.6.12), putem scrie

$$Q = \left(1 + \frac{A_b}{A_Y}\right) T_b - \left(1 - \frac{A_a}{A_Y}\right) T_a - \frac{2\sqrt{A_a A_b T_a T_b}}{A_Y} \cos \theta. \quad (12.6.19)$$

Se obține astfel o relație care permite aflarea energiei de reacție pe o cale distinctă de cea oferită de defectul de masă, din (12.6.11). Dar s-a constatat că cele două metode conduc la rezultate identice. Înseamnă că dacă se cunoaște valoarea lui Q , atunci pe baza relației (12.6.19) se poate afla energia cinetică T_b a particulelor ce rezultă din reacție, lucru extrem de important mai ales pentru cazurile în care particula b este o particulă neutră, care nu-și evidențiază urma într-o instalație de detecție (emulsie nucleară sau camera Wilson cu ceață) și, prin urmare, pentru care T_b nu poate fi determinată direct. Așa se va proceda, de exemplu, în cazul reacției ${}_1^2\text{D}(d, n){}_2^3\text{He}$, pentru care $Q = 3,25$ MeV. Dacă $\theta = 90^\circ$, din (12.6.19) se obține

$$T_b = \frac{A_Y}{A_Y + A_a} \left(Q + \frac{A_Y - A_a}{A_Y} T_a \right) = \frac{3}{4} Q + \frac{1}{4} T_a \quad (12.6.20)$$

și, prin urmare, dacă energia particulelor proiectil are valoarea $T_a = 4$ MeV, atunci din reacție vor rezulta neutroni cu energia $T_b = 7,3$ MeV.

e) *Legea conservării parității.* Întrucât paritatea se conservă în prezența interacțiilor tari, înseamnă că ea va trebui să rămână constantă și în cadrul reacțiilor nucleare. Cu alte cuvinte, paritatea produs a particulelor care intră în reacție va trebui să fie egală cu produsul parităților particulelor care rezultă din reacție. Din această pricină intervin și în cazul reacțiilor nucleare o serie de reguli de selecție, pe baza cărora pot fi studiate atît diversele canale de reacție posibile, cît și caracteristicile cuantice ale particulelor care intră, respectiv care ies dintr-o reacție nucleară.

2. Mărimi caracteristice reacțiilor nucleare. În descrierea reacțiilor nucleare se folosesc două noțiuni de bază și anume — *secțiunea eficace de reacție* σ și *randamentul* η_Y al reacției. Ambele mărimi exprimă probabilitatea de producere a reacțiilor nucleare, prima referindu-se la probabilitatea ca un nucleu să producă într-o secundă un anumit tip de reacție nucleară, iar a doua, la raportul dintre numărul mediu de reacții produse, față de numărul de particule proiectil întrebuintate.

Dacă se notează prin N_0 numărul de particule proiectil ce cad în unitatea de timp pe unitatea de suprafață a unei ținte statice și prin N numărul celor care ajung la o distanță x în interiorul țintei (fig. 12.6.2), atunci pe distanța dx vor reacționa un număr dN de particule proiectil, proporțional cu numărul n de nuclee țintă existente în unitatea de volum, astfel încît

$$-dN = \sigma N n dx. \quad (12.6.21)$$

Coefficientul de proporționalitate σ reprezintă tocmai secțiunea eficace de reacție.

Separînd variabila N în (12.6.21) și integrînd, obținem

$$N = N_0 e^{-\sigma n x} \quad (12.6.22)$$

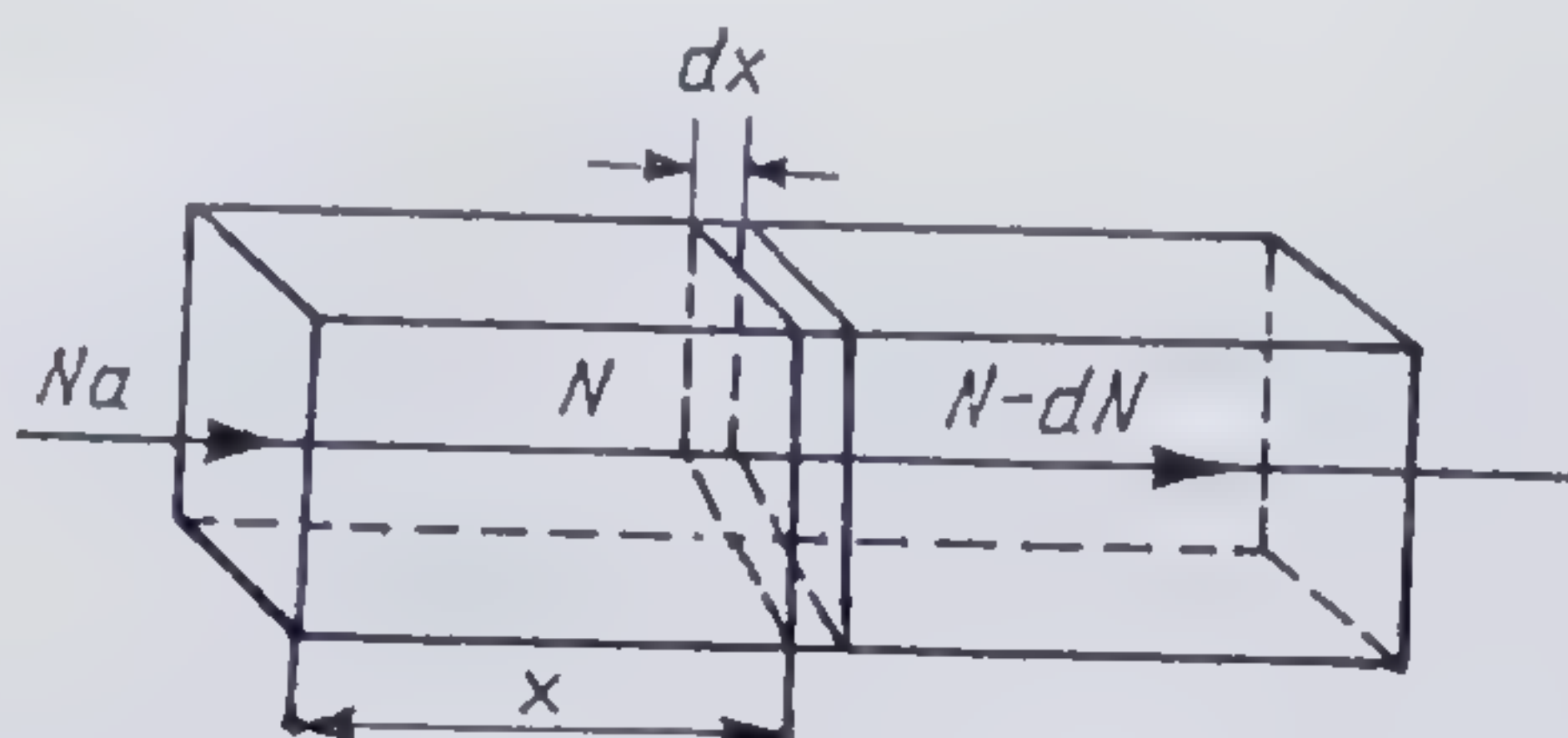


Fig. 12.6.2

expresie din care se observă că σ trebuie să aibă dimensiunea unei arii, exponentul lui „e” trebuind să fie adimensional. Deci

$$[\sigma] = \frac{1}{[nx]} = L^2. \quad (12.6.23)$$

Din acest motiv secțiunea eficace de reacție se exprimă în unități de arie, unitatea uzuală fiind *barnul* (b)

$$1 \text{ b} = 10^{-28} \text{ m}^2. \quad (12.6.24)$$

Secțiunea eficace σ depinde atît de energia T a particulei proiectil, cît și de o serie de caracteristici cuantice ale nucleului țintă, respectiv ale produselor de reacție. A fost creată o *teorie a secțiunilor de reacție*, care se bazează pe teoria cuantică a ciocnirilor, expusă în § 10.5. Se pleacă de la ipoteza că particula proiectil fiind o particulă liberă, starea ei înainte de ciocnire va putea fi descrisă printr-o funcție de undă plană, de forma

$$\psi_i = \psi_0 e^{ikr} = \psi_0 e^{ikz}. \quad (12.6.25)$$

În același timp, avînd în vedere raza scurtă de acțiune a forțelor nucleare, starea particulei împrăștiate, respectiv a celei produse în timpul reacției vor fi descrise de o funcție de undă de forma

$$\psi_d = \frac{1}{r} A(\theta) e^{ikr} \quad (12.6.26)$$

în care amplitudinea s-a luat de forma $A(\theta)/r$ pentru a se asigura condiția de conservare a densității de probabilitate (vezi fig. 12.6.3), adică

$$\int |\psi_i|^2 d\mathcal{V} = \int |\psi_d|^2 d\mathcal{V} \quad (12.6.27)$$

Definind o secțiune eficace de reacție diferențială prin expresia

$$d\sigma = \frac{\text{flux de particule împrăștiate}}{\text{flux de particule proiectil}} \quad (12.6.28)$$

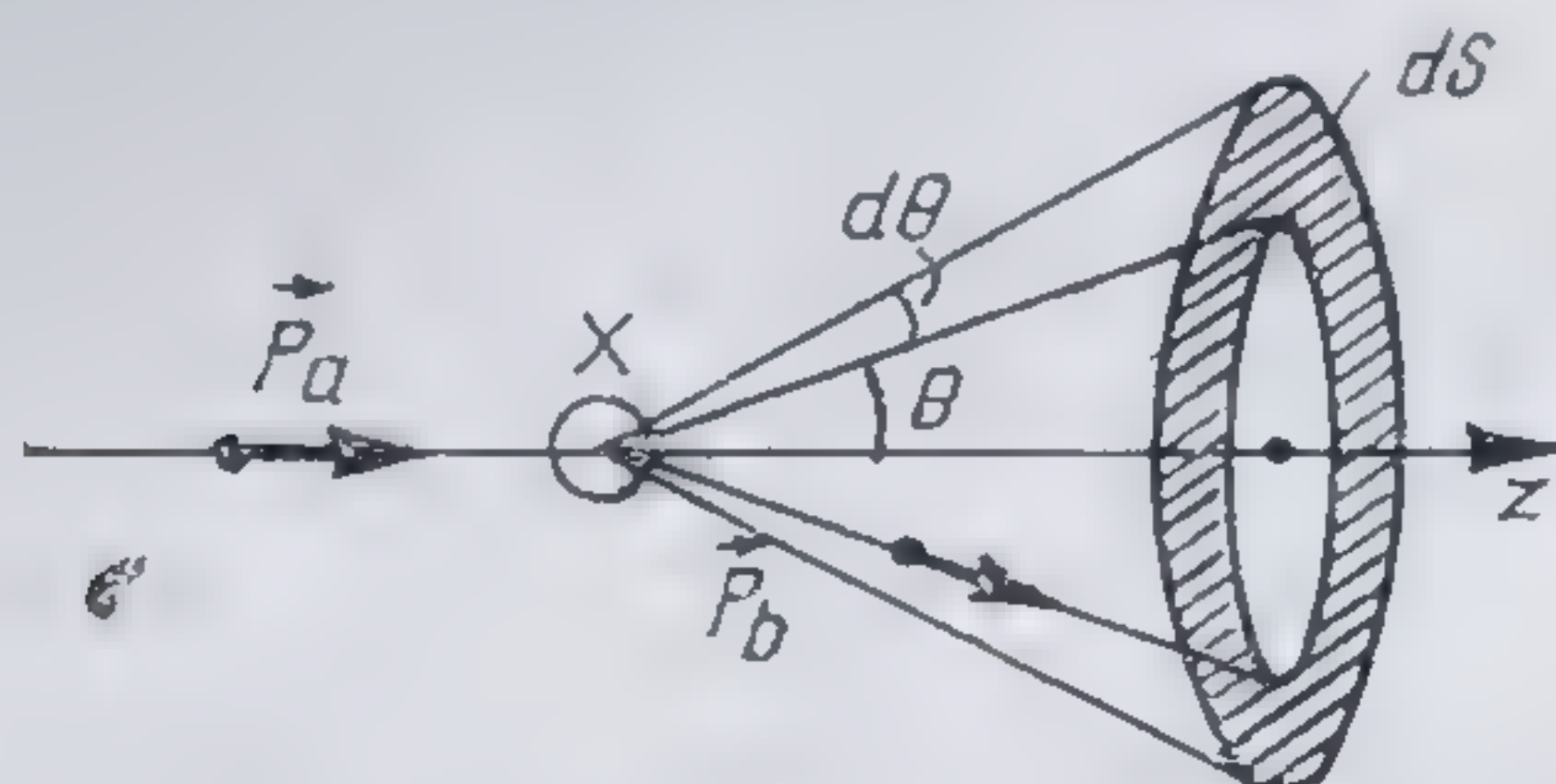


Fig. 12.6.3

atunci cu (12.6.25) și (12.6.26) se obține

$$d\sigma = \frac{|\psi_a|^2 dS}{|\psi_i|^2} = |A(\theta)|^2 \frac{dS}{r^2} \quad (12.6.29)$$

sau avînd în vedere simetria cilindrică a împrăstierii

$$\sigma(\theta) = \frac{d\sigma}{d\Omega} = |A(\theta)|^2 \quad (12.6.30)$$

Desigur că

$$\sigma = \int \sigma(\theta) d\Omega = 2\pi \int_0^\pi |A(\theta)|^2 \sin\theta d\theta \quad (12.6.31)$$

În felul acesta, calcularea secțiunii de reacție se reduce la aflarea funcției de undă ψ_a și respectiv a amplitudinii sale $A(\theta)$. Această funcție de undă ar trebui să poată fi obținută dintr-o ecuație de tip Schrödinger, de forma :

$$\Delta\psi + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \psi = 0 \quad (12.6.32)$$

dar, așa cum s-a menționat în § 12.3, nu se cunoaște forma explicită a energiei de interacție $V(r)$.

Pentru distanțe foarte mari față de nucleu ($r \rightarrow \infty$) însă, avînd în vedere raza scurtă de acțiune a forțelor nucleare, se poate lua $V(r) = 0$ și deci, din rezolvarea ecuației (12.6.32) se obține o funcție de undă de forma (vezi și § 10.2)

$$\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l R_l(r) P_l(\cos\theta) \quad (12.6.33)$$

în care $R_l(r)$ sînt funcții radiale ce depind de numărul cuantic orbital l , avînd expresii de forma (10.2.47), iar $P_l(\cos \theta)$ sînt polinoamele Legendre asociate (10.2.54) (vezi Anexa 4).

Se constată că pentru cazul cînd $r \rightarrow \infty$ se poate scrie

$$R_l(r \rightarrow \infty) = \frac{1}{r} \sin \left[kr - \frac{\pi l}{2} + \varphi_l(k) \right] \quad (12.6.34)$$

unde prin k s-a notat expresia

$$k = \left(\frac{2\mu E}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (12.6.35)$$

$\varphi_l(k)$ fiind o diferență de fază introdusă de respectiva împrăștiere nucleară.

Pe de altă parte, pe baza considerentelor expuse mai sus, funcția de undă care descrie întregul proces de interacție poate fi exprimată ca o superpoziție a funcției de undă incidente $\psi_0 e^{ikz}$ și a celei difuzate $\frac{1}{r} A(\theta) e^{ikr}$, deci

$$\psi(r \rightarrow \infty, \theta) = e^{ikr} + \frac{A(\theta)}{r} e^{ikr} \quad (12.6.36)$$

unde s-a pus $\psi_0 = 1$, întrucît $|\psi_i|^2 = 1$.

Se poate demonstra [8] că

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{\frac{i\pi l}{2}} \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+1/2}(kr) P_l(\cos \theta) \quad (12.6.37)$$

în care prin $J_{l+1/2}(kr)$ s-au notat funcțiile Bessel de ordin $l + \frac{1}{2}$, a căror formă asimptotică este

$$J_{l+1/2}(r \rightarrow \infty) = \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \sin \left(kr + \frac{\pi l}{2} \right). \quad (12.6.38)$$

Prin particularizarea expresiei (12.6.33) pentru cazul cînd $r \rightarrow \infty$ și compararea rezultatului obținut cu (12.6.36) rezultă după, calcule simple, pentru $A(\theta)$ o expresie de forma

$$A(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\varphi_l(k)} - 1) P_l(\cos \theta). \quad (12.6.39)$$

Atunci

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{4k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\varphi_l(k)} - 1) P_l(\cos \theta) \right|^2 \quad (12.6.40)$$

și deci

$$\sigma = \int \sigma(\theta) d\Omega = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \varphi_l(k) \quad (12.6.41)$$

întrucît

$$\int P_l^2(\cos \theta) d\Omega = \frac{4\pi}{2l+1}.$$

Rezultatul obținut mai sus este extrem de interesant, deoarece el ne arată că secțiunea eficace integrală de reacție este determinată numai de diferența de fază $\varphi_l(k)$ pe care o câștigă unda difuzată, respectiv unda care descrie starea cuantică a particulei rezultate din reacție. La rîndul ei, această diferență de fază depinde de numărul cuantic orbital l (vor exista deci împrăștierii de tip s ($l=0$), p ($l=1$), d ($l=2$) ș.a.m.d.), iar prin intermediul lui k , va depinde și de energia E a sistemului. În cazul reacțiilor la energii scăzute, cînd de fapt este valabilă și aproximația lui Born, expusă în § 10.5, valoarea lui $\varphi_l(k)$ fiind foarte mică ($\varphi_l(k) \ll \frac{\pi}{2}$), relația (12.6.41) se reduce la forma

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \varphi_l^2(k). \quad (12.6.42)$$

Pentru calcularea lui $\varphi_l(k)$, W. Heisenberg a creat, în anul 1942, o metodă cuantică specială, care este cunoscută sub denumirea de *metoda matricei de împrăștiere*. Această metodă constă în introducerea unui operator de împrăștiere \hat{S} care „transferă” funcția de undă incidentă ψ_i în funcția difuzată ψ_d , adică

$$\psi_d = \hat{S} \psi_i \quad (12.6.43)$$

Atunci, se poate lua

$$\psi(r, \theta) = \frac{1}{r} (e^{-ikr} - \langle S \rangle e^{ikr}). \quad (12.6.44)$$

De remarcat că în reprezentarea Heisenberg (vezi § 8.5) operatorul \hat{S} va fi exprimat printr-o matrice, de unde provine și denumirea de metodă a matricei de împrăștiere. Valorile proprii ale lui $\langle S_l \rangle$ sînt legate de $\varphi_l(k)$ prin relația

$$\langle S_l \rangle = e^{2i\varphi_l(k)}. \quad (12.6.45)$$

Dar $\varphi_l(k)$ depinde (prin intermediul lui k) de energia E a sistemului de microparticule care participă la respectiva reacție. Pentru a ține cont de această dependență, în condițiile în care nu dispunem de o teorie unitară

asupra forțelor nucleare, se admite, pe baza modelului nuclear optic (vezi § 12.1), că numărul de undă k este o mărime complexă, de forma

$$k = k_1 + ik_2. \quad (12.6.46)$$

În aceste condiții desigur că și $\varphi_l(k) = \varphi_{l1} + i\varphi_{l2}$, termenul al doilea exprimând o absorbție.

În cazul absorbțiilor rezonante, determinate de prezența stărilor energetice cuantificate ale nucleului, trebuie să avem

$$e^{i\varphi_l(k)} \rightarrow 0; \quad S_l(k_n) \rightarrow \infty. \quad (12.6.47)$$

Valorile lui l_n , pentru care este satisfăcută condiția (12.6.47), reprezintă așa numiții „poli Regge” ai matricei \hat{S}_l , datorită faptului că T. Regge a reușit să formuleze, în anul 1959, o metodă de calcul a lui $\langle S_l \rangle$, în prezența unor astfel de puncte de discontinuitate.

Un calcul de acest fel a fost făcut de către E. Breit și P. Wigner pentru o împrăștiere rezonantă de tip $S(l=0)$. El a condus la o expresie de forma :

$$\sigma_{ab} = \frac{4\pi}{k^2} \frac{\Gamma_a \Gamma_b}{(E - E_n)^2 + \Gamma^2/4} \quad (12.6.48)$$

în care $\Gamma = \Gamma_a + \Gamma_b$, Γ_a și Γ_b fiind semilărgimile nivelelor cuantice, legate de durata stărilor excitate τ , prin relații de tipul $\Gamma = \hbar/\tau$.

Se remarcă, pe baza considerațiilor succinte făcute asupra secțiunii eficace de reacție, că în cazul unei reacții simple de tipul (12.6.4) se poate scrie

$$\sigma_{ab} = \frac{d\sigma_{ab}}{d\Omega} = \langle |S_{ab}|^2 \rangle (2l_a + 1) (2l_b + 1) \frac{P_b^2}{P_a^2} \quad (12.6.49)$$

expresie care derivă direct din (12.6.41) prin înlocuirea $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ și definirea unei matrice de împrăștiere medii $\langle |S_{ab}|^2 \rangle$.

Din cele de mai sus se obține că pentru o reacție endoenergetică, la T_a de valori mici, când $p_a = m_a v_a$ și $p_b = m_b v_b \simeq \sqrt{2m_b |Q|}$, secțiunea eficace de reacție crește odată cu micșorarea vitezei v a particulei proiectil, întrucît

$$\sigma \simeq \frac{\text{ct.}}{v_a}. \quad (12.6.50)$$

Acest rezultat explică eficiența mare a reacțiilor cu neutroni termici.

Randamentul η_Y al unei reacții nucleare este dat de raportul dintre numărul reacțiilor produse efectiv și numărul de particule proiectil întrebuințate. Acest raport are, în general, valori extrem de mici, de ordinul lui $10^{-3} \div 10^{-2}$.

Avînd în vedere expresia (12.6.22), pentru randamentul η_Y al unei reacții nucleare se va putea scrie expresia

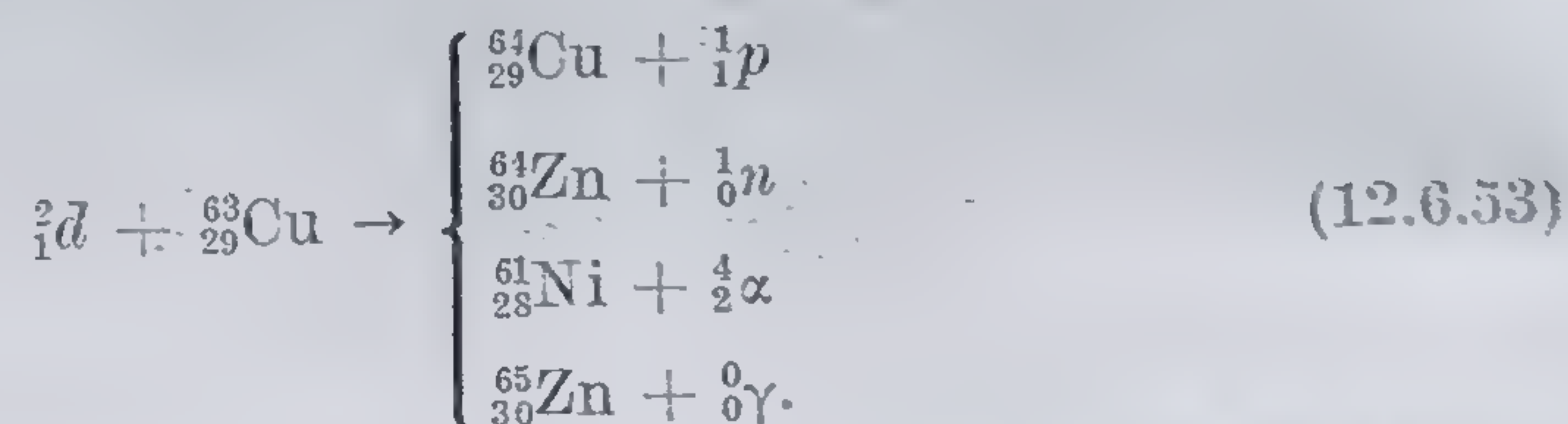
$$\eta_Y(T) = \frac{\Delta N}{N} = n \int_0^T \sigma(T) dx \quad (12.6.51)$$

respectiv

$$\eta_Y(T) = n \int_0^T \frac{\sigma(T) dT}{dT/dx}. \quad (12.6.52)$$

Se observă că și randamentul η_Y este condiționat de dependența de energia T a secțiunii eficace de reacție σ . El depinde însă și de modul de atenuare dT/dx a particulelor în mediul țintei.

3. Mecanisme de reacție. Experimental s-a constatat că există mai multe moduri de desfășurare a reacțiilor nucleare, cunoscute sub denumirea de *mecanisme de reacție*. Astfel, la energii relativ scăzute, reacțiile nucleare se desfășoară după un mecanism de *interacție directă*, în care particula proiectil este captată de nucleul țintă și se emite aproape instantaneu (la un interval de timp $\Delta t < 10^{-22}$ s) o altă particulă, rezultînd un alt nucleu stabil sau radioactiv. În anumite cazuri însă, s-a constatat că particula proiectil poate să genereze, prin bombardarea unor anumite nuclee țintă, mai multe tipuri de nuclee produs și respectiv mai multe tipuri de particule, așa cum este cazul reacției deuteriului 2_1d (nucleul de deuteriu) cu nucleul de ${}^{63}_{29}Cu$, în care se pun în evidență mai multe *canale* de reacție. de forma :



Pentru a putea explica o astfel de reacție nucleară, N. Bohr formulează, în anul 1936, ipoteza formării *nucleului compus*, ca fază nucleară intermediară excitată în desfășurarea unei reacții de tipul (12.6.53). Într-o astfel de viziune, reacția nucleară se desfășoară în două etape distincte și anume : în prima, particula proiectil este captată de către nucleul țintă, formîndu-se un nucleu compus (nucleul de ${}^{65}_{30}Zn$ în reacția (12.6.53)), care se găsește într-o stare de puternică excitație, datorită energiei pe care o aduce particula proiectil (energia de legătură a acesteia în nucleul țintă și energia sa cinetică). În a doua etapă, distinctă de prima, reacția se desfășoară pe diverse canale de reacție. Pe baza unei astfel de ipoteze a fost creată o teorie a reacțiilor nucleare cu formare de nucleu compus (P. Weisskopf, 1959) în care se demonstrează că datorită prezenței regulilor de selecție în tranzițiile nucleare poate interveni faza intermediară, denumită nucleu

compus (X), care are o durată de viață de pînă la 10^{-14} s, interval de timp extrem de lung în comparație cu intervalele de timp în care se desfășoară reacțiile directe (10^{-22} s). După acest interval de timp, în care practic se pierd caracteristicile cuantice inițiale ale nucleului țintă (de exemplu dispar păturile nucleare ca urmare a puternicei excitații produse — nucleul compus manifestînd o comportare descrisă printr-un model nuclear în picătură), nucleul compus va trece, prin diverse canale de reacție, spre stări de energie mai scăzute. Realizarea unui anumit tip de canal este determinată statistic de fluctuațiile formei și ale energiei nucleului compus, fluctuații care pot conduce la expulzarea din nucleu fie a unui nucleon (proton sau neutron), fie a unei particule α . Există, așa cum se observă din (12.6.53), și posibilitatea dezexcitării nucleului compus prin emisia unor fotoni γ .

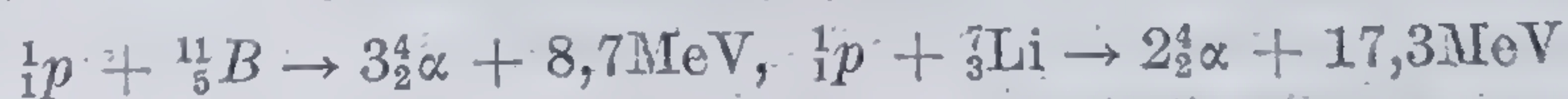
Reacții nucleare cu formare de nucleu compus produc îndeosebi particulele proiectil care aduc un mare surplus de energie în nucleul țintă (energie de legătură mare), cum sînt 1_0n , 2_1d , ${}^3_2\text{He}$, ${}^4_2\alpha$. De exemplu, în reacția (12.6.53) această energie este dată de diferența dintre energia de legătură pe nucleon a (${}^{65}_{30}\text{Zn}$) (care are valoarea de 8,5 MeV) și energia pe nucleon a 2_1d (care are valoarea de 2,3 MeV). Deci deuteronul va aduce o energie suplimentară de 12,4 MeV care se distribuie nucleonilor din nucleul compus (${}^{65}_{30}\text{Zn}$). La energii ridicate, și protonii pot produce astfel de reacții.

4. Clasificarea reacțiilor nucleare. Există mai multe criterii de clasificare a reacțiilor nucleare, criterii care iau în considerație fie energia particulelor proiectil, fie natura acestor particule, fie în sfîrșit mecanismul de reacție. Noi vom expune o succintă clasificare a reacțiilor nucleare după tipul particulelor proiectil și ne vom îndrepta mai mult atenția asupra reacțiilor produse de neutroni, care prezintă un considerabil interes științific și practic.

a) *Reacții produse de protoni.* Produc reacții nucleare numai protonii accelerați care pot escalada bariera de potențial repulsivă ce mărginește un nucleu țintă. Există diverse posibilități de accelerare a protonilor și în general a particulelor proiectil încărcate electric, în instalații denumite *acceleratoare de particule* (vezi §12.7).

Protonii produc reacții de tipul (p, γ) , (p, n) , (p, d) etc. Ei pot constitui și ținte fixe așa cum sînt țintele din parafină, bogate în atomi de hidrogen, care se utilizează mult în studiul reacțiilor de tip nucleon-nucleon, principalele surse de informații asupra forțelor nucleare.

De mare importanță principală par a fi reacțiile de fisiune artificială pe care le pot produce protonii accelerați asupra unor nuclee ușoare, cum sînt reacțiile



care, pe lîngă faptul că sînt reacții exoenergetice, se bucură de proprietatea de a nu fi însoțite de apariția neutronilor, deci nici a unor produse radioactive, ele fiind adevărate reacții, „curate”, care se pretează excelent la folosirea în calitate de surse de energie.

b) *Reacții produse de deuteroni.* Deuteronul poate produce multe și interesante reacții nucleare, care se desfășoară fie după mecanisme directe,

fie prin formarea nucleului compus. Deosebit de interesante sînt reacțiile de tip „stripping”, care permit studierea păturilor nucleare. În figura 12.6.4 este schițată o astfel de reacție și anume reacția $^{31}_{15}\text{P}(d, p)^{32}_{15}\text{P}$, în care se observă că la trecerea deuteronului prin preajma nucleului de fosfor, acesta îi captează neutronul, particula proiectil zburînd mai departe ca proton. Secțiunile eficace de reacție sînt foarte mici pentru nucleele magice, ceea ce

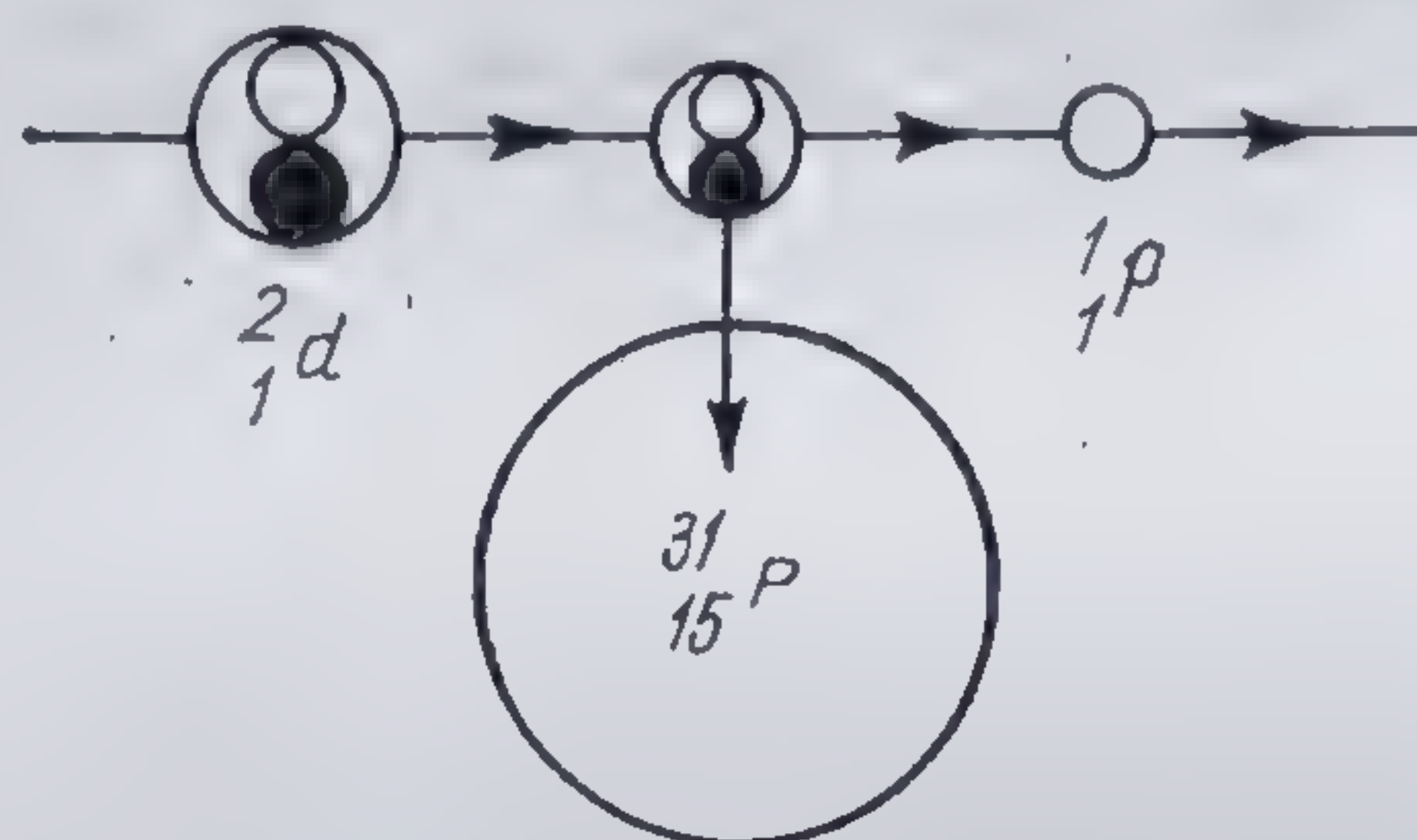
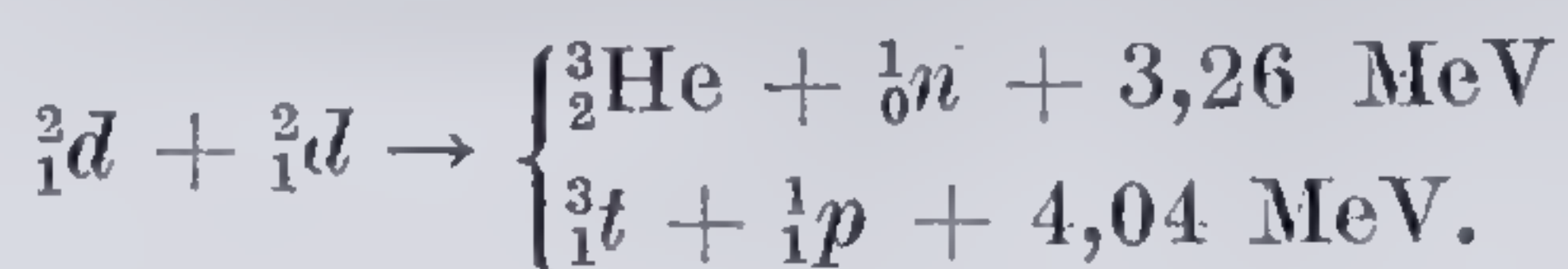
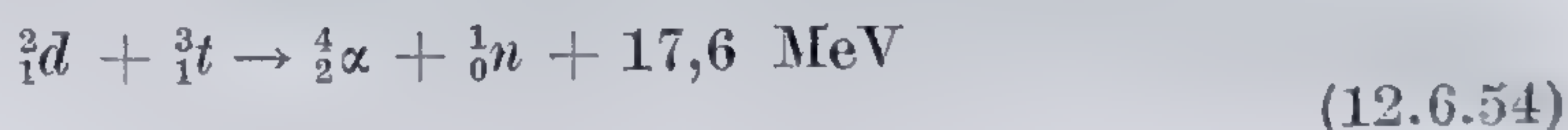


Fig. 12.6.4

înseamnă că intervine o dependență a „afinității nucleonice” față de gradul de umplere al păturilor nucleare, aceasta fiind minimă pentru cazul păturilor complet populate.

Foarte importante sînt reacțiile de *fuziune nucleară* pe care le pot produce deuteronii prin bombardarea altor nuclee ușoare, de tritium ^3_1T sau de deuteriu ^2_1D , deoarece așa cum s-a arătat și în § 12.2 acestea sînt reacții exoenergetice și există posibilitatea producerii lor la scară macroscopică, într-o plasmă foarte fierbinte, întrevăzîndu-se astfel posibilitatea obținerii unei noi surse de energie. Două dintre aceste reacții au fost și sînt intens studiate și anume reacțiile



Ambele pot fi generate de deuteroni accelerați și ținte fixe sau în plasmă de temperatură înaltă, la care energia cinetică a participanților la reacție depășește energia lor coulombiană. S-a constatat că prima reacție, cu tritium, se declanșează la $T \simeq 3 \cdot 10^7 \text{ K}$, iar a doua, la $T \simeq 37 \cdot 10^7 \text{ K}$, dar reacțiile se autoîntrețin la scară macroscopică cu un număr mare de participanți, de ordinul a $10^{20} \div 10^{21} \text{ m}^{-3}$, numai la temperaturi de aproximativ zece ori mai mari.

c) *Reacții produse de $^4_2\alpha$ și ^3_2He .* Reacțiile produse de particulele α prezintă interes atît istoric (prima reacție nucleară a fost obținută cu un astfel de proiectil), cît și practic, de laborator, deoarece o reacție de tipul $^9_4\text{Be}(\alpha, n)^{12}_6\text{C}$, obținută prin amestecarea unei sări de radium cu beriliu metalic, este o sursă de neutroni ușor de realizat pentru studii de laborator. Dintre reacțiile produse de nucleul izotopului ușor ^3_2He menționăm așa-numita

reație de tip „pick-up”, schițată în figura 12.6.5, deoarece și ea, la fel ca reacția de tip stripping, permite stabilirea și studiul păturilor nucleare. Secțiunea eficace a acestor tipuri de reacție se micșorează pe măsură ce nucleul țintă se apropie de un nucleu magic și atinge o valoare minimă când acesta este magic.

d) Reacțiile produse de neutroni sînt cele mai numeroase, datorită faptului că neutronul este un proiectil de mare eficiență pentru producerea

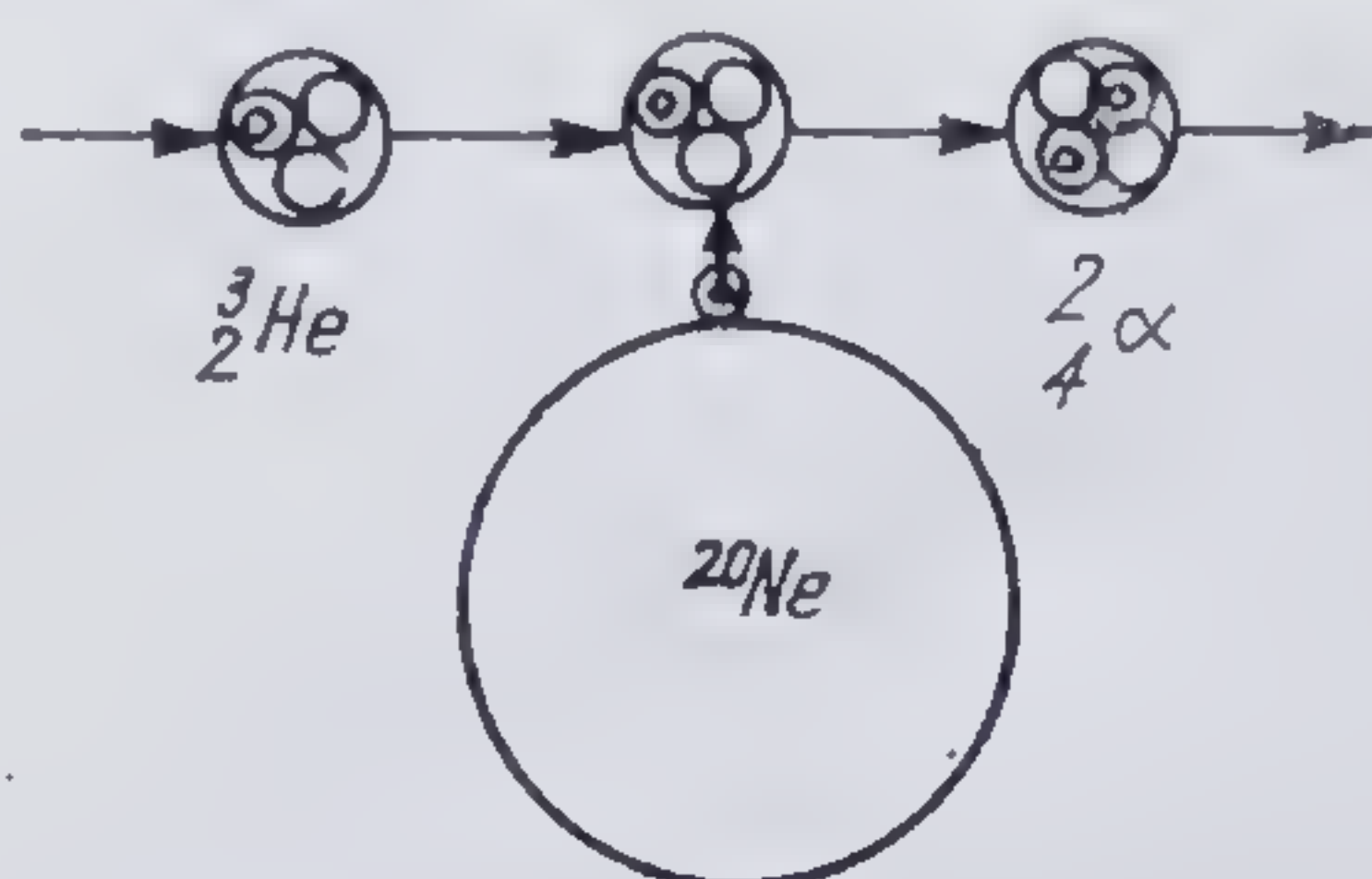


Fig. 12.6.5

reacțiilor nucleare. În primul rînd, pentru neutron nucleeele țintă nu prezintă bariere repulsive coulombiene de potențial, iar în al doilea rînd, neutronii aduc un surplus de energie cel puțin egală cu energia lui de legătură în nucleu (care pentru nucleeele medii este de aproximativ 8,5 MeV).

Prima reacție în care s-au produs neutroni a fost obținută de Bothe și Becker, în anul 1930, prin bombardarea beriliului metalic cu particule α , emise de un preparat de radium. Din această reacție s-a obținut o radiație cu mare putere de penetrație pe care autorii ei au presupus-o a fi o radiație γ de mare energie. Dar, soții Joliot-Curie constată că această radiație interacționează puternic cu nucleeele de hidrogen din parafină (deci cu protonii) și dacă ar fi vorba de fotoni, aceștia ar trebui să aibă energii extrem de mari, de ordinul a 50 MeV (energie evaluată prin măsurarea reculului protonilor din parafină). Din măsurători de recul asupra protonilor, respectiv asupra nucleelor de ^{14}N , J. Chadwick reușește să demonstreze, în anul 1932, că radiația ce apare în reacția beriliului cu particule α este constituită din particule neutre, cu masa de repaus apropiată de masa protonului, care au fost denumite *neutroni**.

Neutronii pot produce reacții nucleare de următoarele tipuri: (n, α) , (n, p) , (n, γ) , (n, n) , $(n, 2n)$ și reacția de fisiune nucleară. De regulă, reacțiile (n, γ) și (n, n) pe nucleee țintă de masă medie se produc în mod rezonant, adică secțiunea lor de reacție prezintă o serie de maxime (vezi fig. 12.6.6), în concordanță cu formula Breit-Wigner (12.6.48), dacă energia neutronilor este de ordinul a $1 \div 10$ eV. Acești neutroni se numesc, din această pricină, *neutroni de rezonanță*. De remarcat, din fig. 12.6.6, că intervine și o scădere treptată cu E_n a secțiunii de reacție, în conformitate cu legea (12.6.50).

* Ipoteza existenței unor astfel de particule a fost formulată de Rutherford, încă din anul 1920.

Astăzi se dispune de o gamă extrem de largă de neutroni, începând cu neutronii ultrareci, care posedă o energie de numai 10^{-7} eV și mergând pînă la neutroni rapizi, cu $E_n = 1 \div 15$ MeV. Se pot realiza surse de neutroni monocromatici, iar neutronii rapizi pot fi „moderați”, adică transformați în neutroni termici.

Avînd în vedere această mare diversitate de neutroni și calitățile lor deosebite ca proiectile nucleare, s-a dezvoltat extrem de mult și studiul

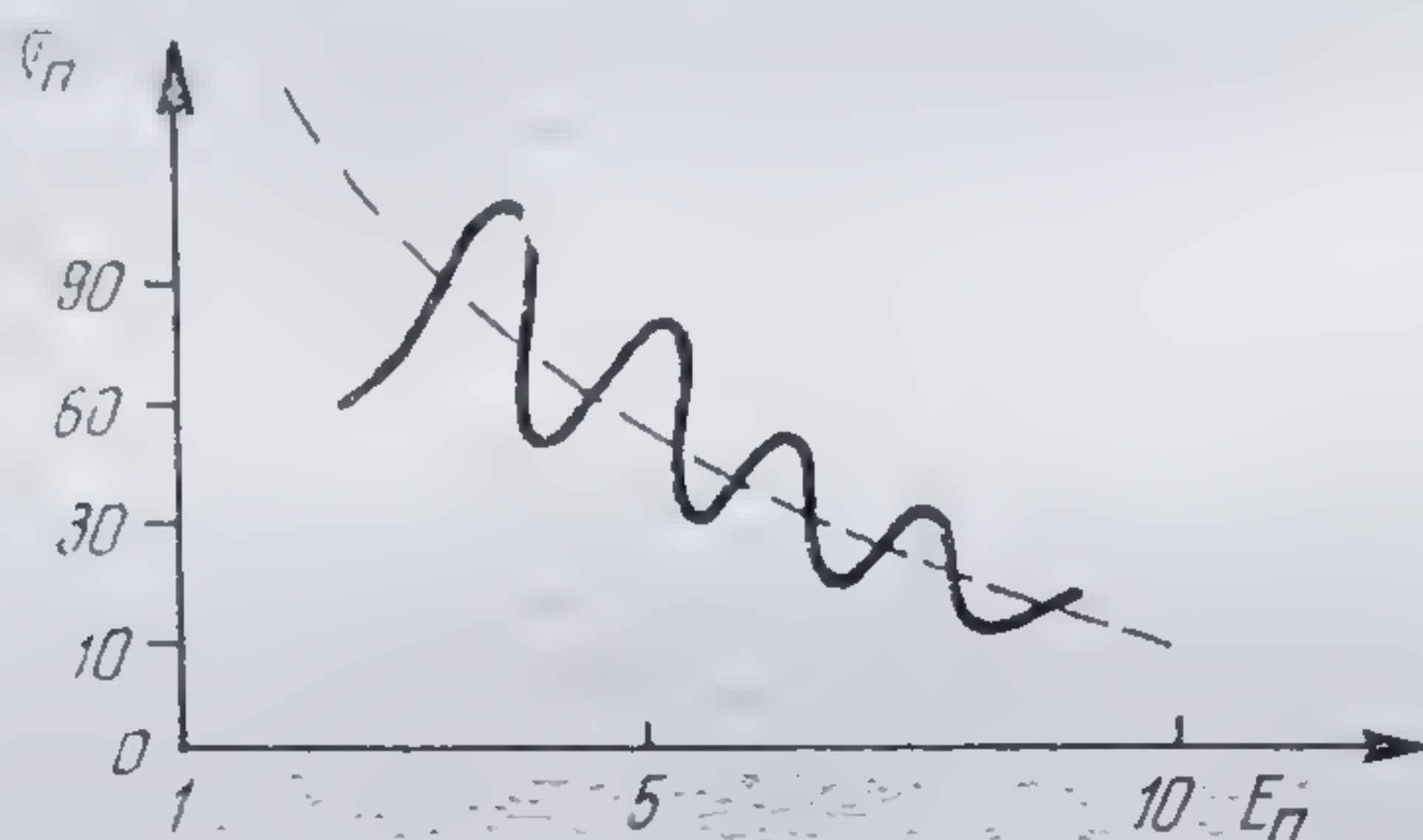
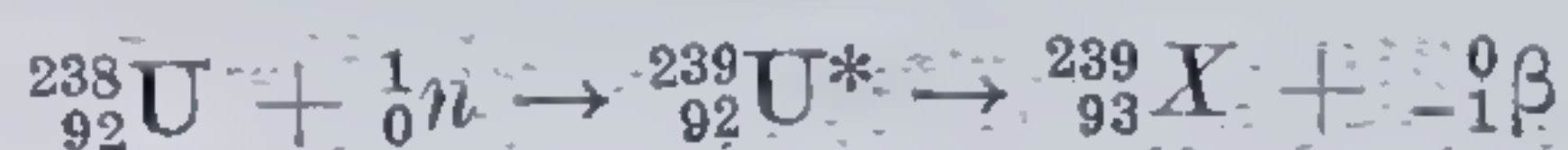


Fig. 12.6.6

proceselor la care participă neutronii. Dintre aceste procese, vom prezenta succint numai două și anume, cele legate de obținerea *elementelor transuraniene* și cele care produc *energie nucleară*, la scară macroscopică.

Primul proces a fost intuit de E. Fermi, care propune în anul 1934 utilizarea neutronilor pentru obținerea elementelor transuraniene, adică a unor elemente artificiale situate după ${}^{238}_{92}\text{U}$. Ideia lui Fermi se bazează pe ipoteza că, prin captarea de neutroni, nucleele de uraniu trebuie să devină β -active și deci prin transmutații de tipul



ar trebui să treacă în nuclee cu $Z > 92$. Această ipoteză s-a dovedit corectă și, la scurt timp, grupul american condus de G. I. Seaborg și grupul de la Dubna, condus de G. N. Flerov, reușesc să obțină pe această cale un număr de 15 elemente transuraniene și anume: ${}_{93}\text{Np}$; ${}_{94}\text{Pu}$; ${}_{95}\text{Am}$; ${}_{96}\text{Cm}$; ${}_{97}\text{Bk}$; ${}_{98}\text{Cf}$; ${}_{99}\text{Es}$; ${}_{100}\text{Fm}$; ${}_{101}\text{Md}$; ${}_{102}\text{Nb}$; ${}_{103}\text{Lw}$; ${}_{104}\text{Ku}$; ${}_{105}\text{Ha}$; ${}_{106}\text{X}$; ${}_{107}\text{X}$; ultimelor două neatribuindu-li-se încă denumiri. Fiecare dintre aceste elemente sînt constituite dintr-o pleiadă de 3 pînă la 16 izotopi (toți radioactivi), afară de ultimii doi ${}_{106}\text{X}$ și ${}_{107}\text{X}$, care au timpi de viață de numai $7,3 \cdot 10^{-3}$ s, respectiv $2 \cdot 10^{-3}$ s.

În general, elementele transuraniene se obțin prin bombardare neutronică de lungă durată în reactorul nuclear sau, mai recent, prin bombardare cu ioni grei accelerați. Einsteiniul ${}_{99}\text{Es}$ și fermiul ${}_{100}\text{Fm}$ s-au obținut în urma unor explozii nucleare.

Reacția de fisiune nucleară a nucleelor grele a fost descoperită de grupul O. Hahn, F. Strassmann și Liese Meitner, care constată că nucleul de ${}^{235}_{92}\text{U}$ se rupe în două părți de mase aproximativ egale sub acțiunea bombardării cu neutroni termici ($E_n = 0,021$ eV). O astfel de reacție are sec-

țiunea de reacție foarte ridicată, de ordinul $\sigma \approx 500$ barni și un randament de 83% într-un preparat de $^{235}_{92}\text{U}$ pur.

Prima teorie a unui proces de fisiune nucleară a fost creată de N. Bohr și J. Wheeler, pe baza modelului nuclear în picătură. Ei admit că sub acțiunea neutronului termic captat, nucleul de uraniu intră într-o stare puternic excitată. În această stare pot interveni fluctuații de formă, care, prin jocul forțelor nucleare superficiale și al celor coulombiene, pot conduce la ruperea în două a nucleului, așa cum este schițat în fig. 12.6.7.

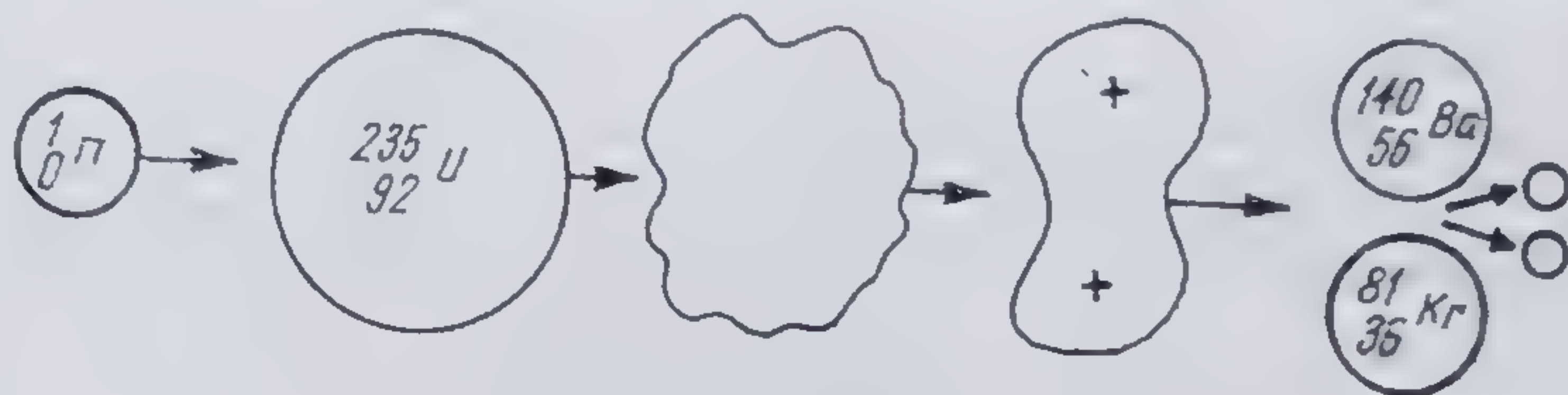


Fig. 12.6.7

Pe baza formulei lui E. Weizsäcker (12.4.7) se constată că procesul de fisiune nucleară este posibil numai dacă energia coulombiană W_2 este egală sau mai mare decât energia superficială W_1 , adică

$$\frac{a_c Z^2}{R^{1/3}} \geq a_s A^{2/3} \quad (12.6.55)$$

Rezultă de aici că va interveni un proces de fisiune spontană numai pentru cazul în care

$$\frac{Z^2}{A} \geq 45. \quad (12.6.56)$$

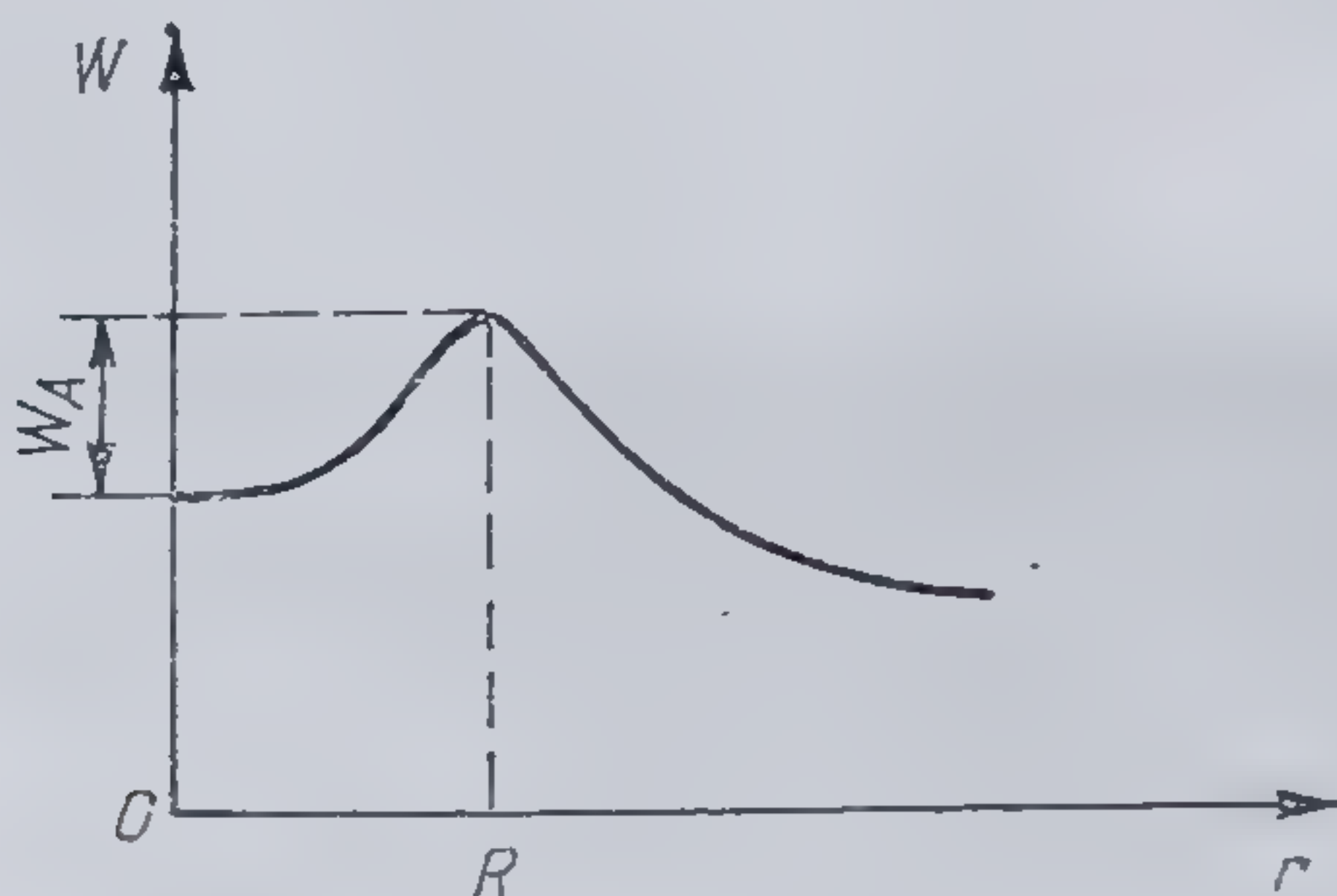


Fig. 12.6.8

La nucleul de $^{235}_{92}\text{U}$ însă, $Z^2/A = 36$ și de aceea reacția de fisiune poate fi declanșată numai dacă se transferă nucleului o energie de activare W_a , dată de expresia (vezi și fig. 12.6.8)

$$W_a = W_1 - W_2 = A^{2/5} \left(0,89 - 0,02 \frac{Z^2}{A^2} \right).$$

Această energie este adusă nucleului de neutronul termic captat, fiind de ordinul de mărime al energiei nucleare de legătură a acestuia.

În anul 1950, Flerov și Petrijaev pun în evidență fisiunea spontană la nucleele de uraniu, care desigur se poate produce printr-un mecanism de tip tunel.

Pe baza formulei lui Weizsäcker se poate demonstra și de ce nucleele grele impare ($^{235}_{92}\text{U}$, $^{239}_{94}\text{Pu}$, $^{241}_{94}\text{Pu}$) fisionează sub acțiunea neutronilor termici, în timp ce nucleele grele pare ($^{238}_{92}\text{U}$, $^{232}_{90}\text{Th}$, $^{240}_{94}\text{Pu}$) pot fisiona numai sub acțiunea neutronilor rapizi. La captarea unui neutron de către un nucleu cu A impar se formează un nucleu cu A par, a cărui energie de legătură este cu δ (δ fiind energie de paritate) mai mare decât a nucleelor impare, acest surplus de energie eliberându-se ca energie de excitație a nucleului.

Primul proces de fisiune a $^{235}_{92}\text{U}$ s-a desfășurat probabil după schema

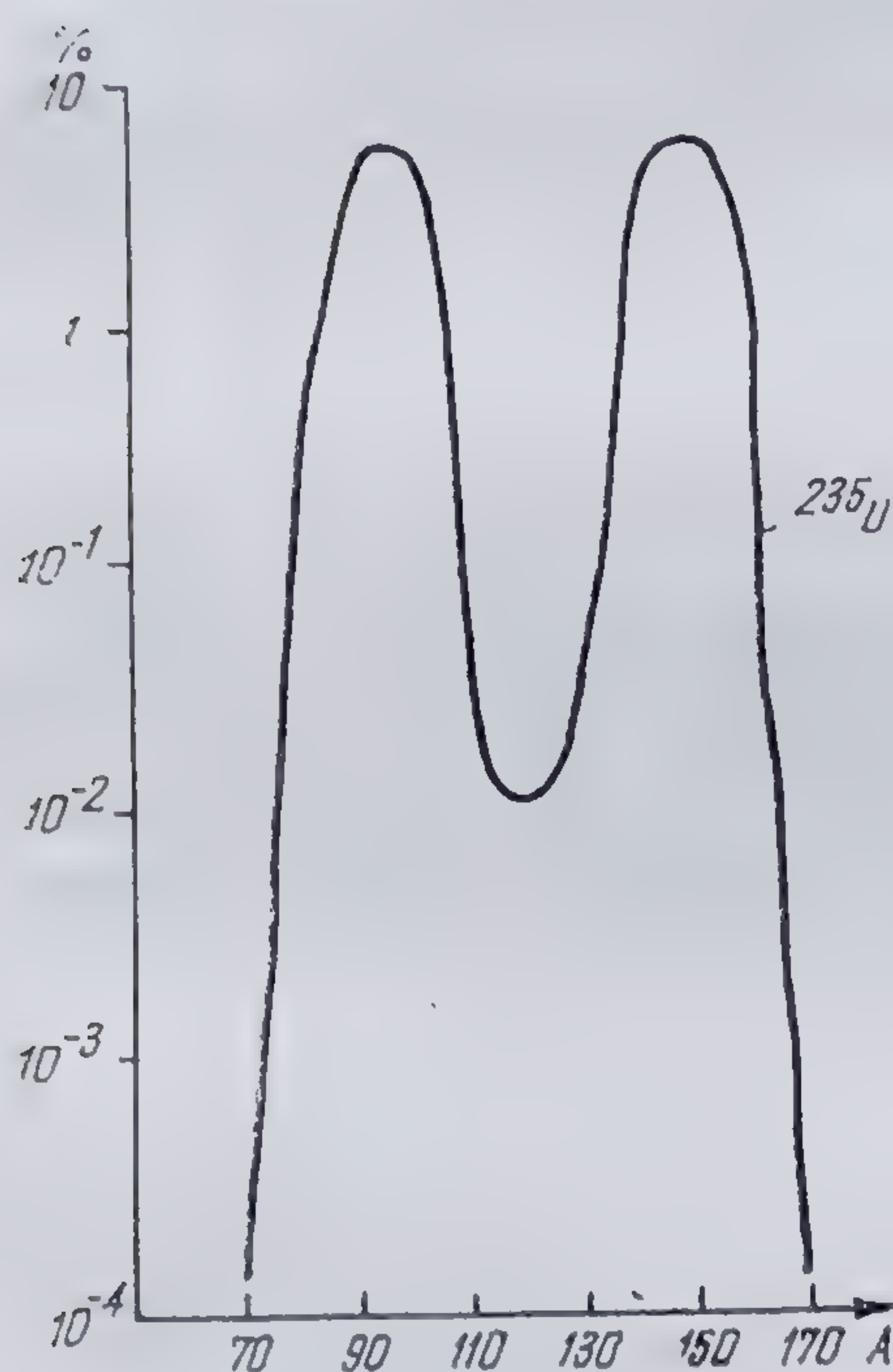
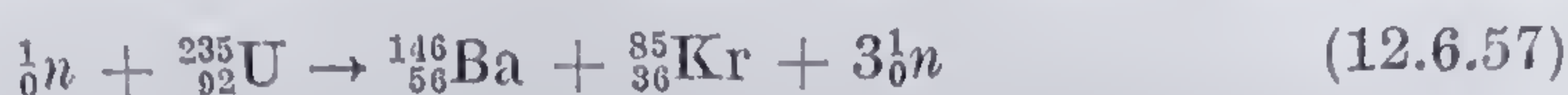


Fig. 12.6.9

dar, ulterior, Joliot-Curie, Becker și Cook au pus în evidență o serie de produse de fisiune, care se distribuie în funcție de A pe o curbă cu două maxime (fig. 12.6.9), situate în jurul valorilor 82 și 140 (legate probabil de prezența păturilor nucleare corespunzătoare numerelor magice $A - Z = 50$ și 82). De asemenea, s-a constatat că în timpul reacției, sau la scurt interval după producerea ei, se eliberează $2 \div 3$ neutroni rapizi [7].

Reacția de fisiune a nucleelor grele este o reacție puternic exoenergetică, energia de reacție fiind de ordinul $Q \simeq 197 \text{ MeV}$. Acest lucru a atras atenția în mod deosebit, mai ales după ce S. Flügge întrevește posibilitatea desfășurării în lanț a unei reacții de fisiune nucleară, prin „termalizarea” neutronilor rapizi rezultați din respectiva reacție.

c) Reacții produse de ioni grei.

Aceste reacții sînt realizări de dată recentă [110], tranziția nucleară fiind produsă de ioni cu $Z > 2$, accelerați în puternicele acceleratoare de particule încărcate, pînă la energii de ordinul a $20 \div 30 \text{ MeV/nucleon}$. Pe această cale se obțin informații asupra forțelor nucleare, dar se speră și în obținerea unor elemente supragrele, din seria corespunzătoare păturii a 7-a nucleare, care ar trebui, așa cum s-a menționat mai sus, să fie stabile.

§ 12.7. ALTE SURSE DE RADIATII NUCLEARE. ACCELERATOARE DE PARTICULE ȘI RADIATIA COSMICĂ

1. Acceleratoare de particule. S-a văzut în paragraful precedent că unele dintre caracteristicile reacțiilor nucleare depind de energia particulelor proiectil. Pentru a spori această energie s-a pus problema accelerării respectivelor particule, lucru posibil în cazul particulelor încărcate electric, care pot fi accelerate în câmpuri electrice și magnetice, dacă posedă un timp de viață cel puțin egal cu durata accelerării.

Se supun accelerării, de regulă, electronii, protonii, particule mai grele ${}^2\text{d}$, ${}^3\text{He}$, ${}^4\alpha$ și alți ioni ai diferitelor elemente, inclusiv grele. Instalațiile în care se realizează o astfel de accelerare poartă numele de *acceleratoare de particule*. Gama acceleratoarelor de particule este astăzi extrem de mare și de aceea se impune o clasificare a lor după diverse criterii, cum sînt forma traiectoriei parcurse de particulele supuse accelerării — *acceleratoare liniare* și *acceleratoare ciclice* — sau viteza particulelor în raport cu c — *acceleratoare nerelativiste* ($v \ll c$) și *acceleratoare relativiste* ($v \lesssim c$).

De notat că în toate acceleratoarele moderne de particule sînt accelerate grupuri de particule, folosindu-se *principiul autofazării*, descoperit de Veksler (1944) și McMillan (1945). Acest principiu stabilește că există posibilitatea grupării particulelor supuse accelerării în jurul celor „fazate”, adică al acelor care îndeplinesc *condiția de sincronism* și de *stabilitate a traiectoriei*, care trec deci prin câmpul accelerator mereu în momentul cînd sensul și valoarea acestuia sînt optime procesului de accelerare. Se obține astfel o accelerare repetată sau continuă care conduce la o creștere accentuată a energiei particulelor supuse accelerării [118, 119].

a) *Acceleratoarele liniare* sînt instalații în care traiectoria particulelor supuse accelerării este o linie dreaptă; ele pot fi nerelativiste sau cu *undă staționară* și *relativiste* sau cu *undă progresivă*.

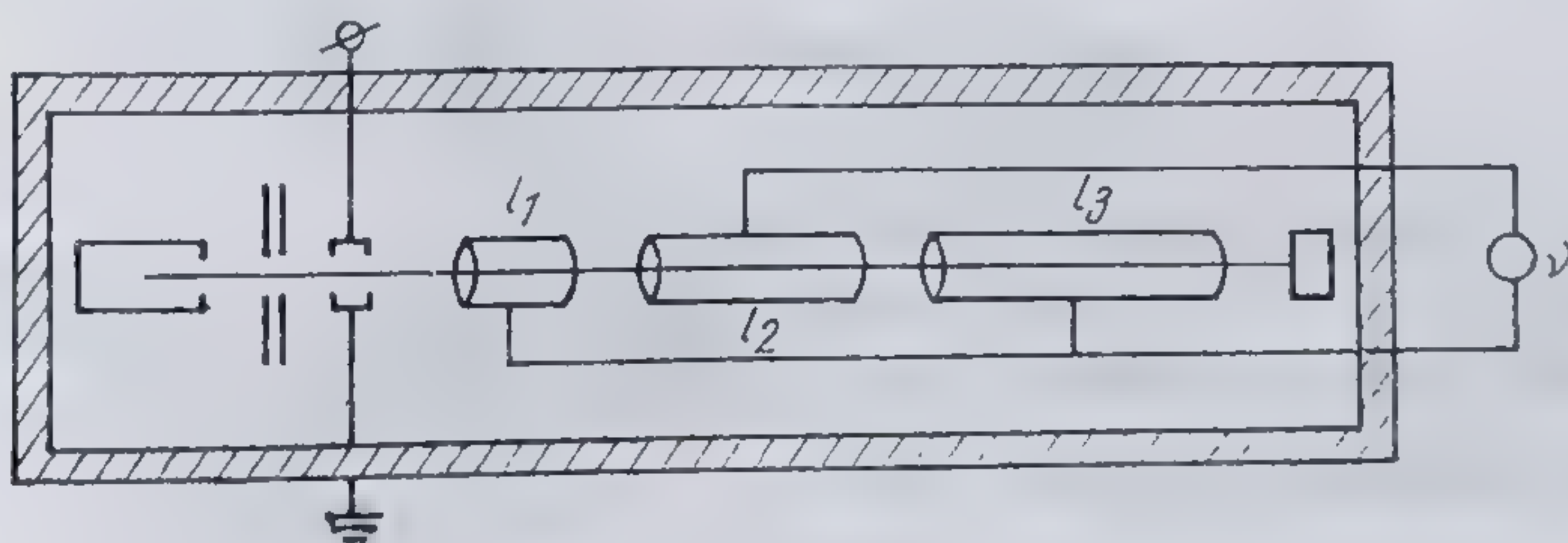


Fig. 12.7.1

În figura 12.7.1 este schițat un accelerator cu undă staționară, în care particulele supuse accelerării se deplasează în lungul axei comune a mai multor electrozi de accelerare (tuburi metalice de formă cilindrică) alimentate la o tensiune alternativă U , de frecvență constantă ν .

Accelerarea intervine la trecerea particulelor prin intervalul ce separă doi astfel de electrozi succesivi, dacă trecerea se face în condiții de sincronism, adică atunci când sensul câmpului electric în aceste porțiuni este favorabil accelerării. Întrucât în interiorul electrozilor de accelerare câmpul electric este nul (datorită ecranării electrice), rezultă că satisfacerea condiției de sincronism intervine numai atunci când este satisfăcută egalitatea

$$t = \frac{l_1}{v_1} = \frac{l_2}{v_2} = \dots = \frac{l_n}{v_n} = \frac{1}{2\nu}. \quad (12.7.1)$$

Dacă accelerarea particulei de sarcină q este produsă de o tensiune U , se pot scrie relațiile

$$\frac{mv_1^2}{2} = qU, \dots, \frac{mv_n^2}{2} = nqU \quad (12.7.2)$$

n fiind numărul electrozilor de accelerare. Atunci din cele două relații de mai sus rezultă imediat următoarea condiție de sincronism

$$l_n = \sqrt{n} l_1. \quad (12.7.3)$$

În acest caz, particula nerelativistă supusă accelerării va străbate distanța

$$L = \sum_{n=1}^N l_n = \sum_{n=1}^N \lambda \left(\frac{nqU}{2mc^2} \right)^{1/2} \quad (12.7.4)$$

respectiv, pentru cazul când $N \gg 1$,

$$L \simeq \lambda \left(\frac{qU}{2mc^2} \right)^{1/2} \int_0^N n^{1/2} dn = \frac{2}{3} \lambda \left(\frac{qUN}{2mc^2} \right)^{1/2} \quad (12.7.5)$$

și va câștiga energia

$$E = NqU = (2mc^2)^{1/2} \left(\frac{3LqU}{2\lambda} \right)^{2/3}. \quad (12.7.6)$$

De exemplu, protonii accelerați într-un accelerator liniar, cu $L = 12$ m, la $U = 10$ kV și $\nu = 200$ MHz vor câștiga energia $E_p = 30$ MeV.

În cazul acceleratorului liniar cu undă progresivă se pot accelera și particule relativiste, pentru care $T = m_0 c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - 1 \right)$ și deci

condiția de sincronism se va schimba în forma :

$$l_n = \frac{v_n}{2\nu} = \frac{\lambda}{2} \left[1 - \left(\frac{m_0 c^2}{T_n + m_0 c^2} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (12.7.7)$$

Primul accelerator de acest fel a fost construit în anul 1928, de către Wideröe, pe baza principiului formulat cu patru ani mai înainte de către Laing și anume, a posibilității accelerării unei particule într-o undă de grup a cărei viteză este mărită treptat în timpul accelerării.

Principalul avantaj al acceleratoarelor liniare cu undă progresivă este dat de intensitatea relativ ridicată a fasciculului de particule accelerate, exprimată prin curentul electric pe care acestea îl determină (se ajunge până la $I \simeq 300 \mu\text{A}$). Acest parametru le face utilizabile atât ca injectoare de particule în alte acceleratoare de mare putere, cât și ca surse de mezonii, când se accelerează particule grele (p, α), până la 300 MeV, cum este cazul acceleratorului de la Los Alamos (S.U.A.).

b) *Acceleratoare ciclice.* Din cursurile elementare de fizică este bine cunoscut *ciclotronul* — accelerator ciclic nerelativist, realizat în anul 1931 de către Lawrence. El este constituit din doi duanți, a și b (fig. 12.7.2), alimentați la o tensiune alternativă U , de frecvență constantă. Accelerarea se produce la trecerea particulelor prin intervalul dintre cei doi duanți. În interiorul acestor duanți câmpul electric este nul, iar particula se va mișca pe o traiectorie circulară, sub acțiunea forței Lorentz pe care o creează câmpul de inducție magnetică B , orientat perpendicular pe planul celor doi duanți.

După N rotații, particula va acumula o energie cinetică

$$T_N = 2NqU \quad (12.7.8)$$

dacă frecvența ei de rotație este menținută egală cu *frecvența ciclotronică*

$$\nu_c = \frac{qB}{2\pi m_0} \quad (12.7.9)$$

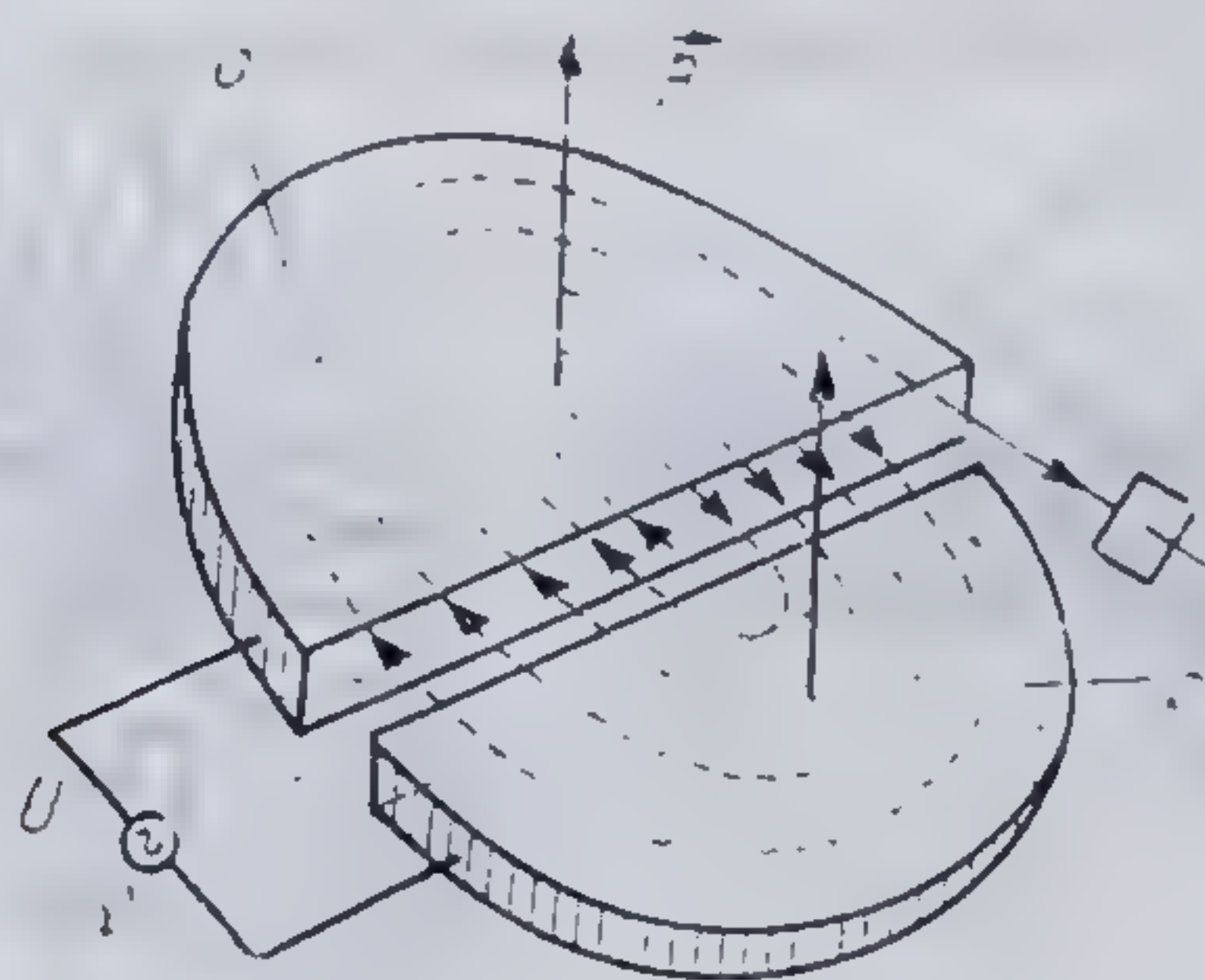


Fig. 12.7.2

Desigur că, în acest caz, energia maximă acumulată de particulă va depinde de raza de curbura R_{max} a ultimei orbite

$$E = \frac{q^2 B^2 R_{max}^2}{2m_0 U} \quad (12.7.10)$$

ea va fi atinsă după ce particula efectuează N rotații. Deci

$$N = \frac{qB^2 R_{max}^2}{4m_0 U}. \quad (12.7.11)$$

Se constată astfel că pentru $U = 300$ kV și $R_{max} = 1,6$ m se pot obține protoni cu energia $E_p = 21$ MeV, după ce aceștia efectuează $N = 180$ rotații.

Principalul avantaj al ciclotroanelor îl constituie intensitatea relativ ridicată a fasciculului de microparticule accelerate ($I \simeq 1$ mA). Această caracteristică le face utilizabile în producerea de radioizotopi și în cercetare.

Condiția de sincronism (12.7.9) își păstrează valabilitatea și în cazul particulelor relativiste, cu condiția să luăm $mc^2 \equiv E$, deci

$$\nu_c = \frac{qBc^2}{2\pi E}. \quad (12.7.12)$$

Rezultă că pe măsură ce energia E a microparticulei accelerate crește, va trebui fie să micșorăm frecvența ν_c , fie să creștem inducția magnetică B , fie să le variem în sens convenabil pe amândouă. Există instalații construite în care se folosesc toate cele trei posibilități și anume: în *fazotroane* se micșorează ν pe măsură ce E crește, în *sincrotrone* se crește B , menținându-se R și ν constante, iar în *sincrofazotroane* se menține numai R constant, B fiind treptat crescut, iar frecvența ν micșorată pe măsura ce accelerarea crește. Tuturor celor trei posibilități le corespund acceleratoare nerezonante.

În figura 12.7.3 este schițat un fazotron, iar în figura 12.7.4 un sincrotron. De observat că în cazul fazotronului se folosește un singur duant

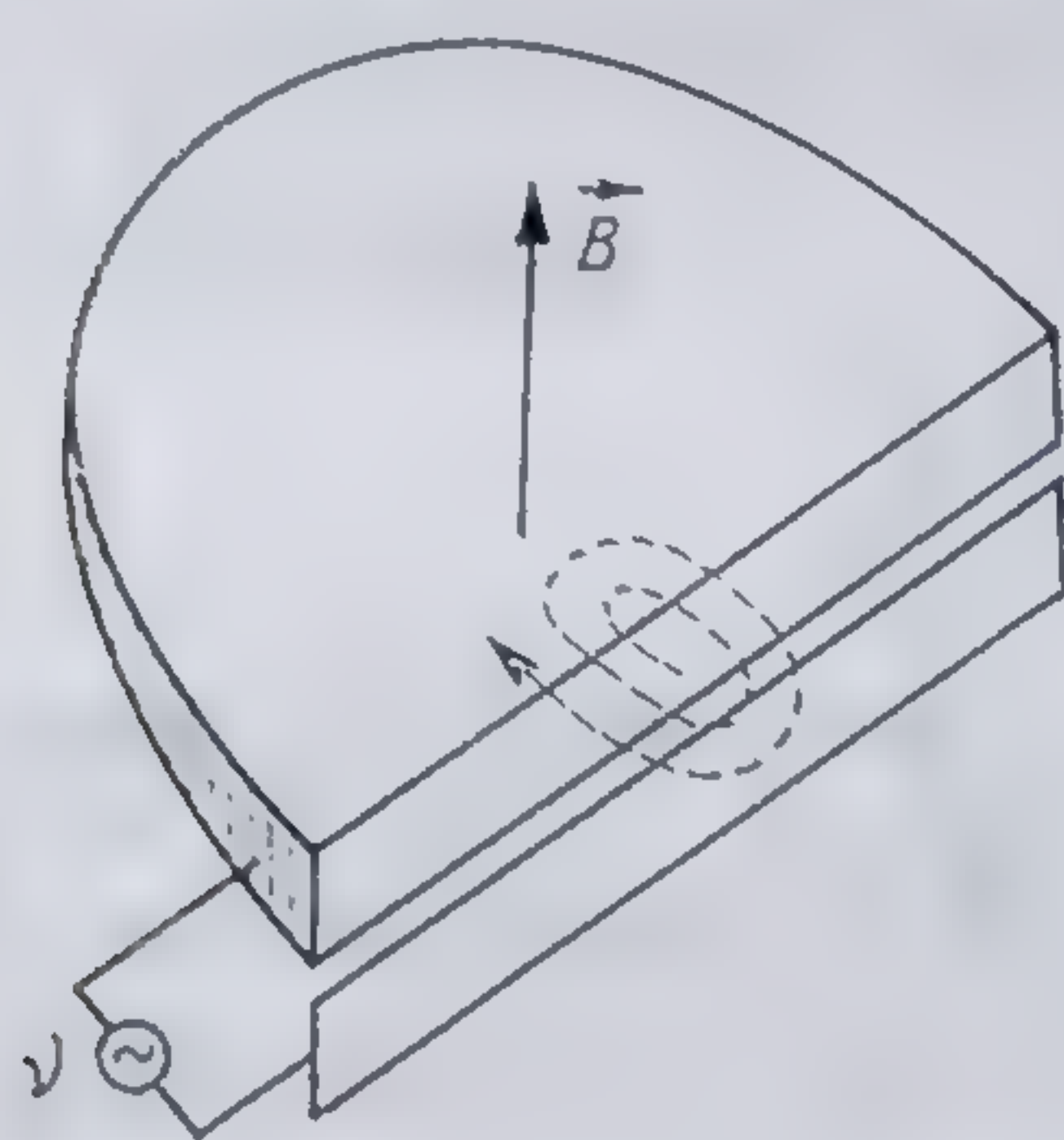


Fig. 12.7.3

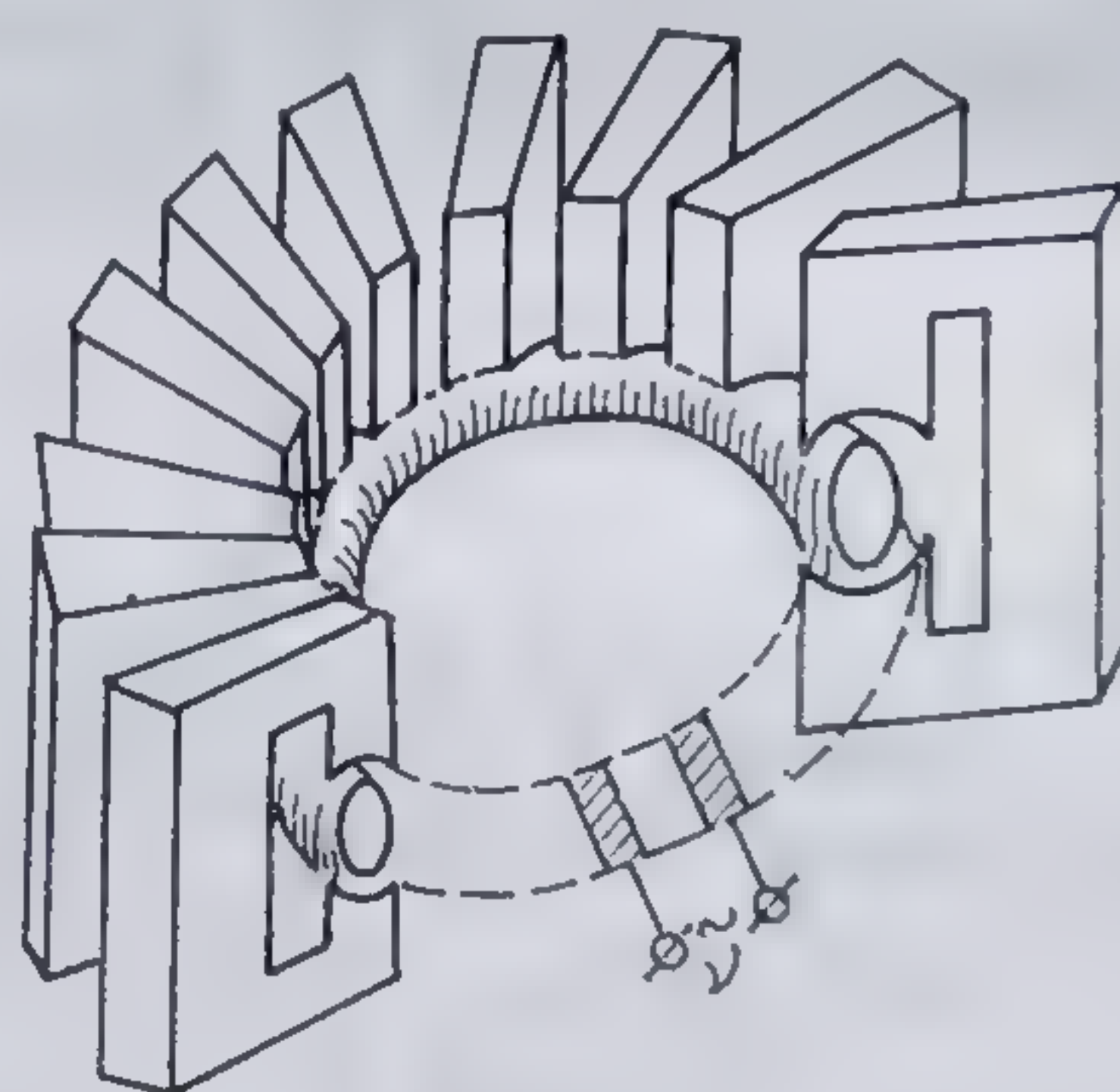


Fig. 12.7.4

(celălalt fiind înlocuit cu un cadru dreptunghiular), iar frecvența lor de alimentare este micșorată pe măsură ce accelerarea progresează.

În figura 12.7.5 este schițat un sincrofazotron în care caz se folosesc incinte torcidale de accelerare și camere de accelerare, CA, la care frecvența de alimentare ν este micșorată odată cu creșterea energiei E de accelerare.

Toate acceleratoarele relativiste sînt instalații gigantice; ele reușesc să sporească energia particulelor grele (p , d , α , ioni) pînă la valori de ordinul a $10 \div 100$ GeV ($1 \text{ GeV} = 10^3 \text{ MeV}$), iar a celor ușoare pînă la $1 \div 12$ GeV. De exemplu, sincrofazonul de la Institutul Unificat de Cer-

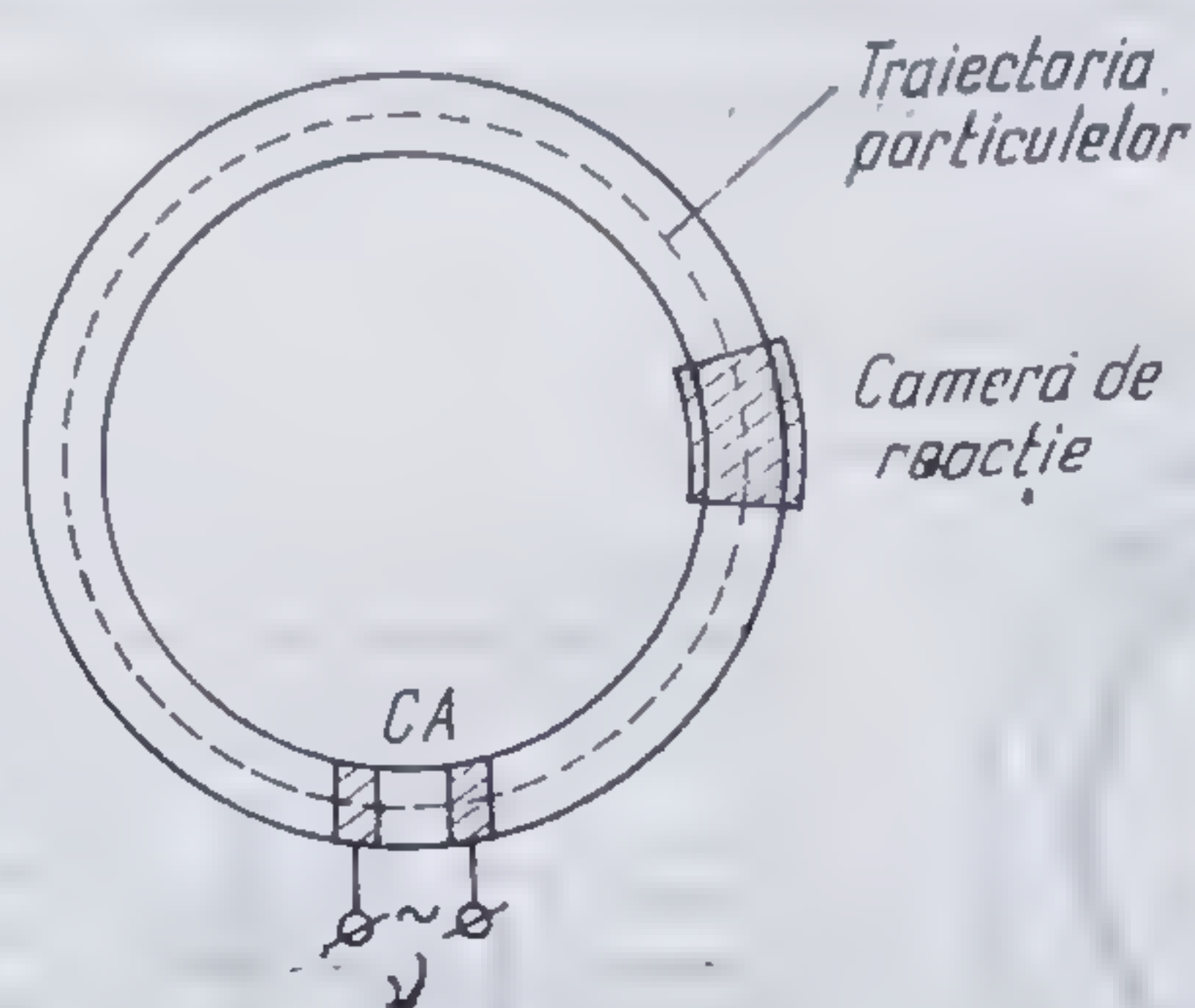


Fig. 12.7.5.

cetări nucleare (IUCN — Dubna, U.R.S.S.) accelerează protoni pînă la 10 GeV, iar cel de la Centrul European de Cercetări Nucleare (CERN) de la Geneva accelerează protonii pînă la 28 GeV. La Serpuhov (U.R.S.S.) există un sincrofazon de 76 GeV, a cărui cameră toroidală de accelerare are raza de 236,14 m și secțiunea de $11,5 \times 17 \text{ cm}^2$, în care protonii efectuează peste $4 \cdot 10^5$ rotații pînă la accelerarea finală.

Creșterea în continuare a energiei de accelerare este legată de dificultăți și cheltuieli deosebit de mari, din care cauză specialiștii de la CERN au imaginat o nouă metodă de sporire a eficienței unui accelerator. Această metodă se bazează pe utilizarea unor *inele de stocare*, în care particulele accelerate într-o primă repriză, sînt rulate pînă ce în a doua repriză este

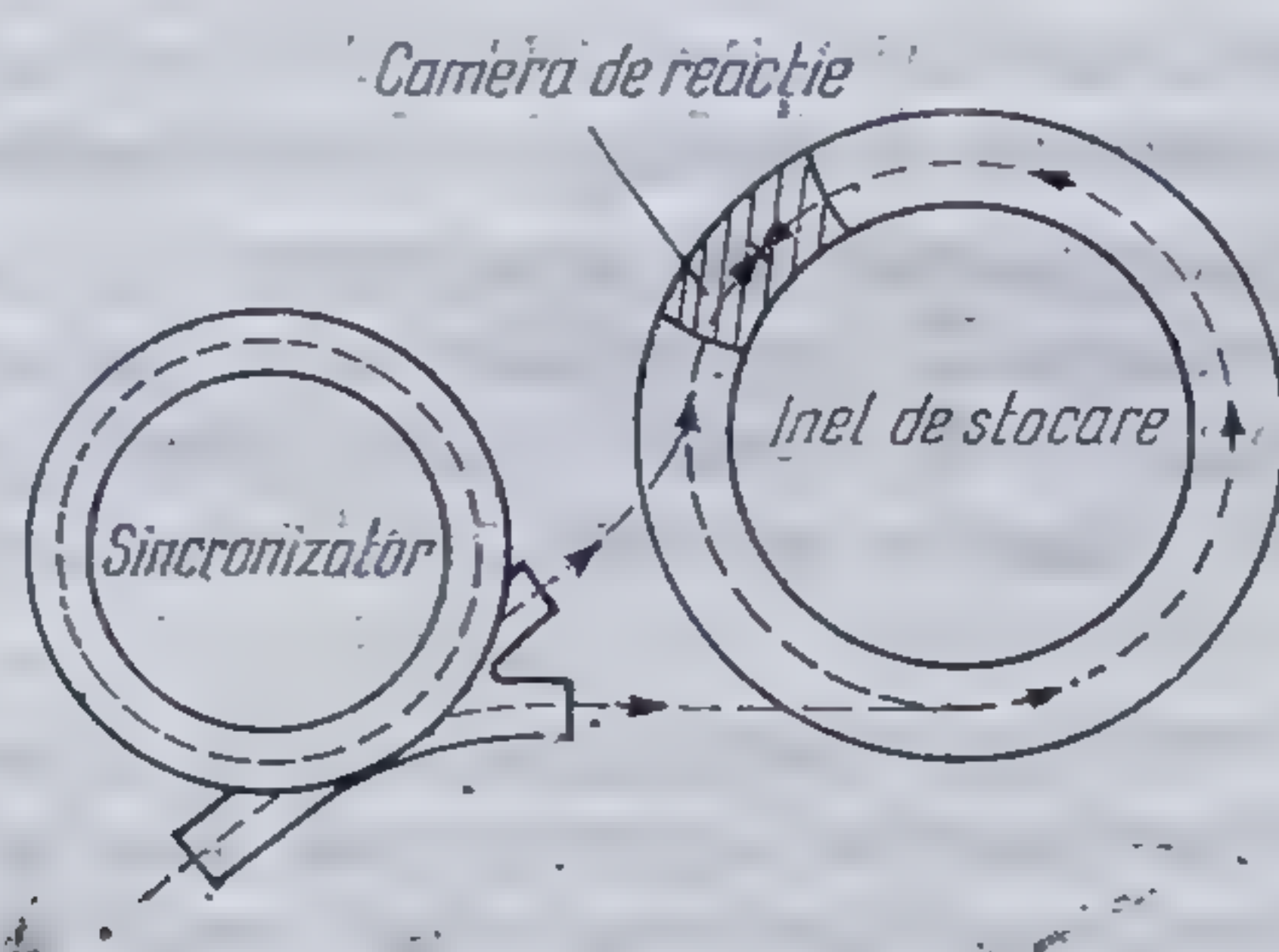


Fig. 12.7.6

accelerat un nou grup de microparticule care sînt trimise asupra primelor în sens contrar (fig. 12.7.6). În felul acesta, într-o cameră de reacție, practic toată energia de accelerare este transferată respectivei reacții, întrucît impulsul inițial al partenerilor de reacție este aproape nul și, ca atare, nu va exista o energie de recul.

Caleulele conduc la concluzia că pentru acceleratorul de 28 GeV, se pot obține energii echivalente de 1700 GeV.

Betatronul este un accelerator specializat pentru accelerarea electronilor relativisti ($E \geq 1$ MeV). El a fost realizat pentru prima dată în anul 1941 de către Kerst, pe baza unei idei a lui Wideröe, de a utiliza cîmpul electric indus (prin inducție electromagnetică). Întrucît liniile unui astfel de

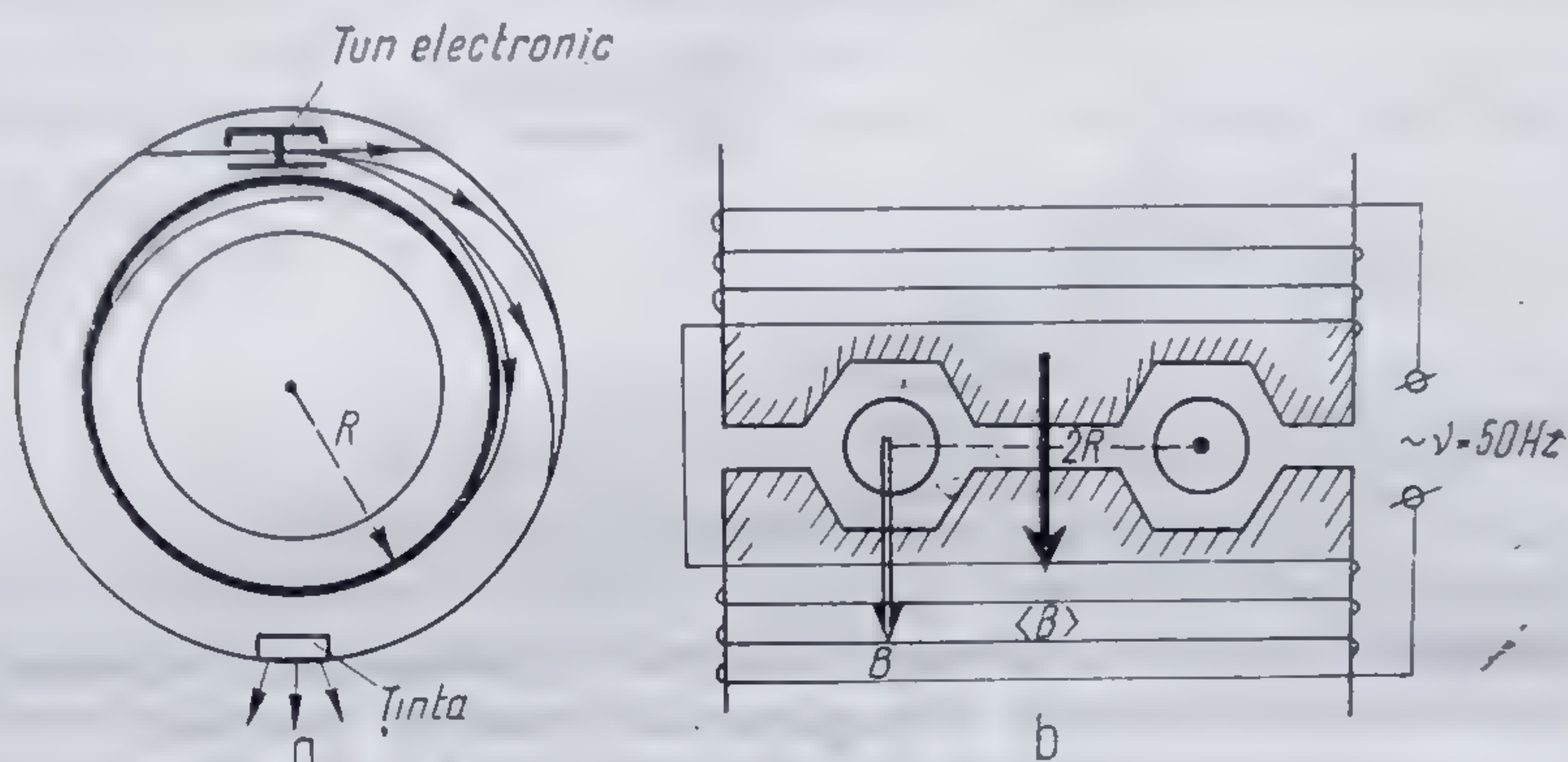


Fig. 12.7.7

cîmp sînt curbe închise, dacă traiectoria particulei supusă accelerării se va suprapune peste o astfel de linie de cîmp, atunci această particulă va fi accelerată în mod continuu, putînd cîștiga energii E_β de valori ridicate.

Desigur, va trebui să fie îndeplinită și o condiție de sincronism, de forma:

$$\langle B \rangle = 2B. \quad (12.7.19)$$

adică inducția magnetică mediată pe întreaga arie a orbitei electronului să fie de două ori mai mare decît inducția B pe respectiva orbită.

Betatroanele cu energii mici de accelerare ($1 \div 10$ MeV) se folosesc pentru producerea de radiații X și γ (utilizate în defectoscopie), iar acceleratoarele pentru electroni cu $E_\beta = 10^2 \div 10^3$ MeV, care funcționează de regulă în impulsuri, sînt folosite pentru producerea altor tipuri de particule elementare.

Prin urmare, ca surse de radiații nucleare se folosesc, în afară de izotopii radioactivi, și acceleratoarele de particule. Radiațiile nucleare constituite din particule neutre, cum sînt neutronii, se obțin în *reactorul nuclear*, sau din diverse reacții nucleare. De exemplu, un amestec de beriliu metalic cu o sare de $^{226}_{88}\text{Ra}$, $^{210}_{84}\text{Po}$ sau $^{239}_{94}\text{Pu}$, reprezintă o sursă utilă de neutroni pentru cercetări de laborator.

2. **Radiația cosmică** constituie o sursă naturală de radiații nucleare de o mare varietate, atît sub aspectul energiei cît și al compoziției. Radiația cosmică a fost pusă în evidență prin studii de conductibilitate electrică a atmosferei, care au relevat o creștere a gradului de ionizare a aerului cu

înmulțimen (fig. 12.7.8), fenomen determinat tocmai de interacția *radiației cosmice primare* cu atmosfera. Încă în anul 1912, V. Hess demonstrează acest lucru, *radiația cosmică secundară* conținând o mare varietate de particule, cu energii cuprinse între 1 și 10^{20} eV.

La nivelul mării, *radiația cosmică secundară* prezintă o *componentă moale*, care poate fi reținută de straturi de plumb și o *componentă dură*,

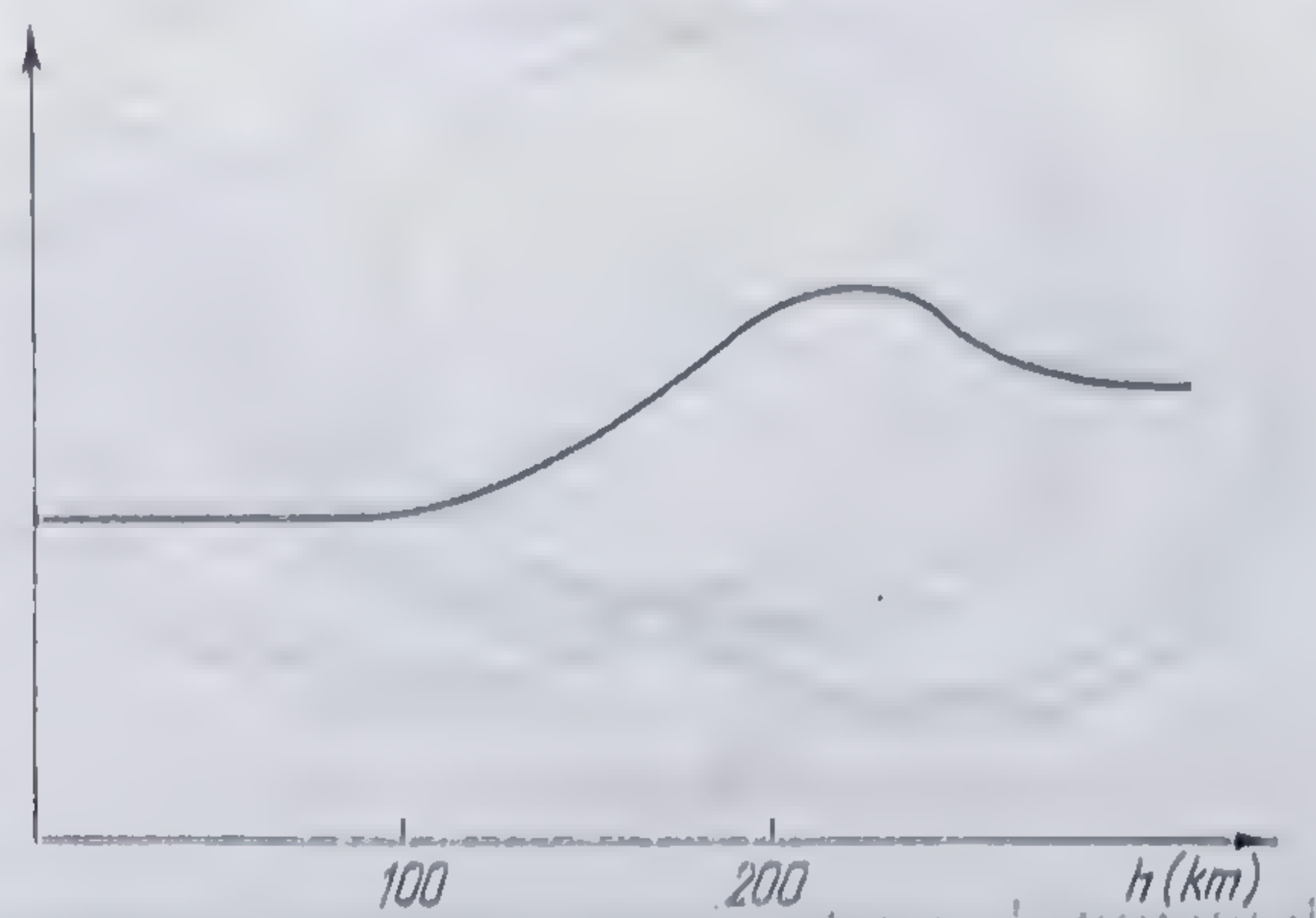


Fig. 12.7.8.

compusă din particule cu mare putere de penetrație. Această componentă dură reprezintă aproximativ 2/3 din intensitatea totală a *radiației cosmice secundare* la nivelul mării.

Este interesant de remarcat că *radiația cosmică* se „durifică” la trecerea prin atmosferă, adică în urma interacției *radiației primare* cu atmosfera iau naștere atât particule de mare putere de penetrație (nucleoni, mezonii π^{+0} , K^+ ; hiperoni), cât și particule ușoare (e^+ , μ^+ , ν etc.) În felul acesta, *radiația cosmică* a constituit și constituie o sursă de *radiații nucleare* de diverse energii și compoziții. Dealtfel, s-a văzut că în *radiația cosmică* a fost descoperită prima antiparticulă (pozitronul e^+), apoi mezonii (μ^+ și π^{+0}) și o parte din hiperoni (particule mai grele decât nucleonii).

Cercetările experimentale au pus în evidență influența pe care o are câmpul magnetic terestru asupra *radiației cosmice*. Această influență se manifestă atât printr-o asimetrie estică a *radiației cosmice primare* (se primește un flux mai mare dinspre est decât dinspre vest), cât și prin *centurile de radiație cosmică* (fig. 12.7.9), descoperite de Van Allen.

Astăzi se știe că *radiația cosmică primară* are intensitatea medie de $2 \div 4$ particule/cm²·s și este compusă în proporție de peste 90 % din protoni, restul fiind format din particule α , 2d , 3He , apoi din nuclee ușoare (Li, Be, B), medii (C, O, N) și grele ($Z = 20 - 30$). Se fac de asemenea cercetări intense pentru depistarea, în *radiația cosmică*, a elementelor cu $Z > 114$.

Una dintre problemele de mare însemnătate în studiul *radiației cosmice* o reprezintă stabilirea originii ei. Există două ipoteze în acest sens: a) *radiația cosmică* apare pe seama proceselor de anihilare din stelele fier-

binți; b) radiația cosmică apare în urma exploziilor din supernove, particulele încărcate fiind apoi accelerate de câmpurile electromagnetice din univers. Studiul acestor aspecte a deschis căi noi de cercetare în *astrofizica nucleară*, știință care încearcă să caracterizeze atât stadiul de evoluție, cât și natura și tipul proceselor stelare. Unul dintre succesele de mare răsu-

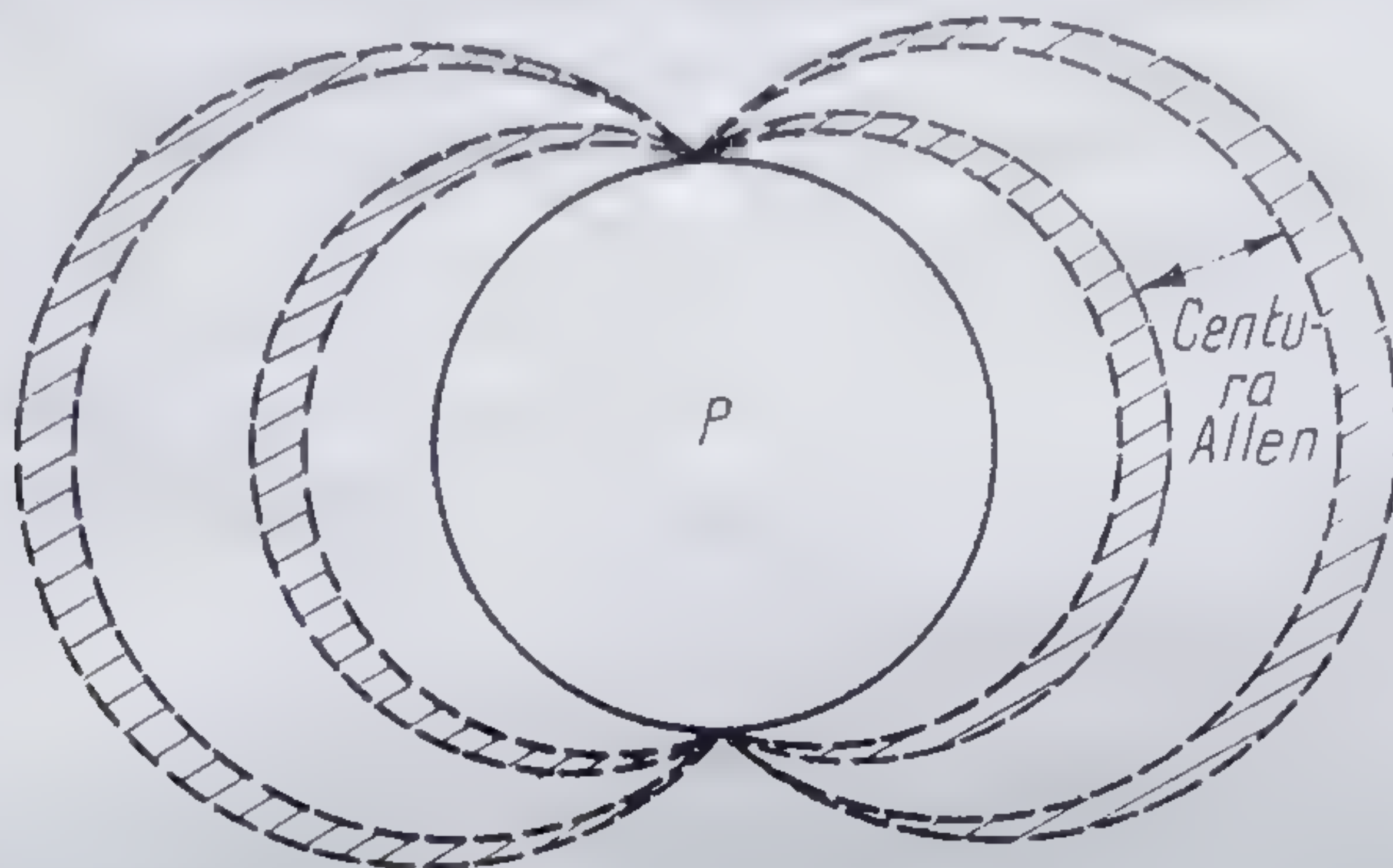


Fig. 12.7.9

net ale acestui domeniu îl constituie prevederea existenței stelelor neutronice (1939, Openheimer și Volkov), cu densități de ordinul a $2 \cdot 10^{20} \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$. Din rîndul acestor stele fac parte și *pulsarii*, stele neutronice care emit în gama radiațiilor X.

§ 12.8. INTERACȚIA RADIAȚIEI CU SUBSTANȚA

Studiul proceselor prin care radiațiile nucleare interacționează cu substanța prezintă interes mai ales din punctul de vedere al utilizării lor în scopuri pașnice, al detecției și al protecției contra radiațiilor nucleare [18, 72, 126]. Se constată că la trecerea unui fascicul de radiații nucleare printr-o substanță intervine o *atenuare* atât a energiei, cât și a numărului de constituenți ce compun respectivul fascicul. Pentru descrierea acestei atenuări s-au definit următoarele două mărimi:

a) *Intensitatea de radiație* I , dată de energia ΔW pe care o transportă fasciculul de radiații prin unitatea de suprafață S , în unitatea de timp Δt

$$I = \frac{\Delta W}{S \Delta t}. \quad (12.8.1)$$

b) *Fluxul de particule* J , definit prin numărul de particule ΔN din fasciculul care traversează unitatea de suprafață în unitatea de timp

$$J = \frac{\Delta N}{S \Delta t}. \quad (12.8.2)$$

Pentru fascicule monoenergetice, în care fiecare particulă este purtătoarea unei energii w , între cele două mărimi va exista legătura

$$I = wJ \quad (12.8.3)$$

asa încît procesul de atenuare poate fi descris prin dependența de distanța x străbătută de fascicul, prin respectiva substanță, a uneia dintre aceste mărimi.

1. **Procese de interacție.** Atenuarea radiațiilor nucleare este determinată de o serie de procese microscopice de interacție cu constituenții atomici sau nucleari ai respectivului mediu, dar pot interveni și procese macroscopice, globale, cauzate de primele, cum sînt încălzirile locale, modificările chimice și efectele biologice. Tipul și intensitatea acestor procese depînd de tipul și energia radiațiilor nucleare, principalele procese microscopice fiind *împrăștierea elastică și neelastică, absorbțiile* (cu producerea unor reacții nucleare, a efectului fotoelectric și generarea de perechi) și producerea *radiațiilor de frînare*, prin frînarea particulelor încărcate (îndeosebi a electronilor și pozitronilor) în cîmpul coulombian nuclear (cum este radiația Cerenkov).

Studiul teoretic al tuturor acestor procese de interacție se face cu metodele mecanicii cuantice, care permit calcularea *secțiunilor eficace de interacție* σ și a *pierderii medii de energie* dE/dx pe unitate de parcurs, mărime funcție de care, pentru anumite tipuri de radiații, se definește un *parcurs* R prin expresia

$$R = \int_E^0 \frac{dE}{-\frac{dE}{dx}} \quad (12.8.4)$$

Sînt *radiații cu parcurs îndeosebi* radiațiile constituite din particule grele (α , p , d , etc.), la care principalul mecanism de interacție este cel al ionizărilor. Întrucît într-un act elementar de ionizare aceste particule con-

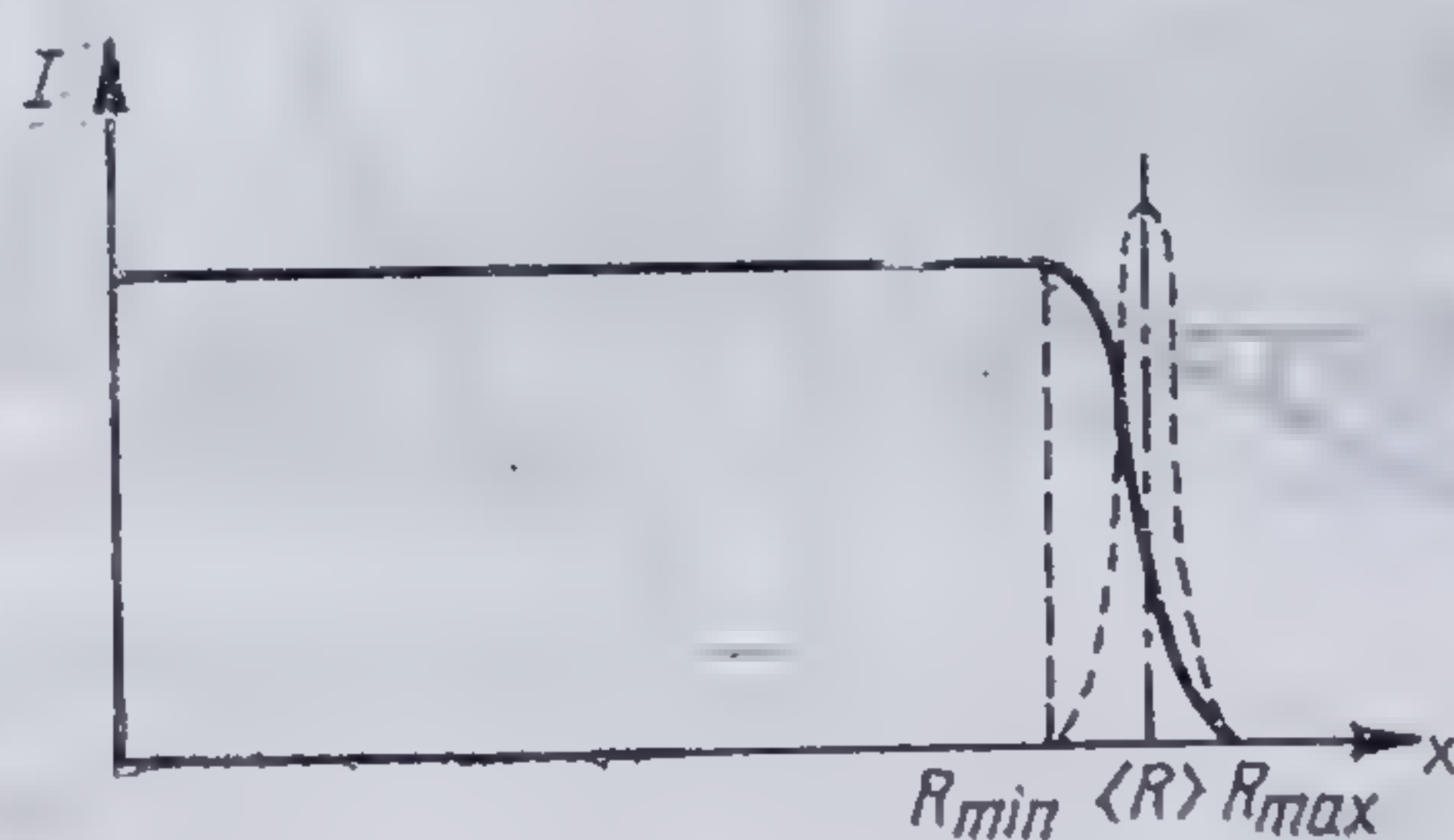


Fig. 12.8.1.

sumă o energie w_0 , mai mică decît energia pe care o posedă inițial, ele se vor deplasa practic în linie dreaptă, pe o anumită distanță R , fără ca numărul lor să varieze (fig. 12.8.1). Desigur că parcursul R va depinde de energia E a particulelor din fascicul, existînd astfel posibilitatea

determinării acestei energii din măsurători de lungime a respectivelor parcursuri.

Radiațiile nucleare constituite din particule ușoare (β^\mp , ${}^0_0\nu$, μ^\mp etc.) produc procese de interacție, de regulă, la nivelul învelișului electronic al atomilor, cum sînt împrăștierea elastice și neelastice și ionizările. La energii mai mari apare radiația de frînare, iar la energii de peste 1 MeV, în cazul fasciculelor de electroni pot interveni procese de anihilare, de tipul: $e^- + e^+ \rightarrow {}^0_0\gamma$, unde $E_\gamma \geq 1.05$ MeV.

Un caz interesant de radiație de frînare este *radiația Cerenkov*. Lui Cerenkov i s-a decernat premiul Nobel (împreună cu I. Tamm E. Frank), pentru descoperirea radiației din domeniu vizibil, ce-i poartă numele, pe care o emite un electron frînat în cîmpul nuclear, atunci cînd viteza lui este mai mare decît viteza luminii în respectivul mediu. Această radiație însoțește electronul sub forma unui con luminos (fig. 12.8.2), din care motiv un astfel de electron a fost denumit *electron luminos*.

De notat că pentru radiațiile β^\mp poate fi definit un parcurs numai în cazul în care intervin doar procese de ionizare. În prezența celorlalte procese apar fluctuații mari ale acestor parcursuri, așa încît radiația β se dovedește a fi mai degrabă o *radiație fără parcurs*, care se atenuează după o lege de formă

$$I = I_0 e^{-\mu x}, \quad (12.8.5)$$

Parametrul μ din această relație este denumit *coeficient liniar de atenuare*. În locul lui este util să folosim coeficienții de *atenuare masică* μ_m , respectiv de *atenuare atomică* μ_a , definiți de expresiile

$$\mu_m \equiv \frac{\mu}{\rho}, \quad \mu_a \equiv \frac{\mu}{n_a} \quad (12.8.6)$$

(ρ —densitatea masică, iar n_a —densitatea atomică a mediului), deoarece acești coeficienți au dimensiunea unor arii și pot fi legați direct de secțiunile eficace de interacție, exprimîndu-se tot în barni.

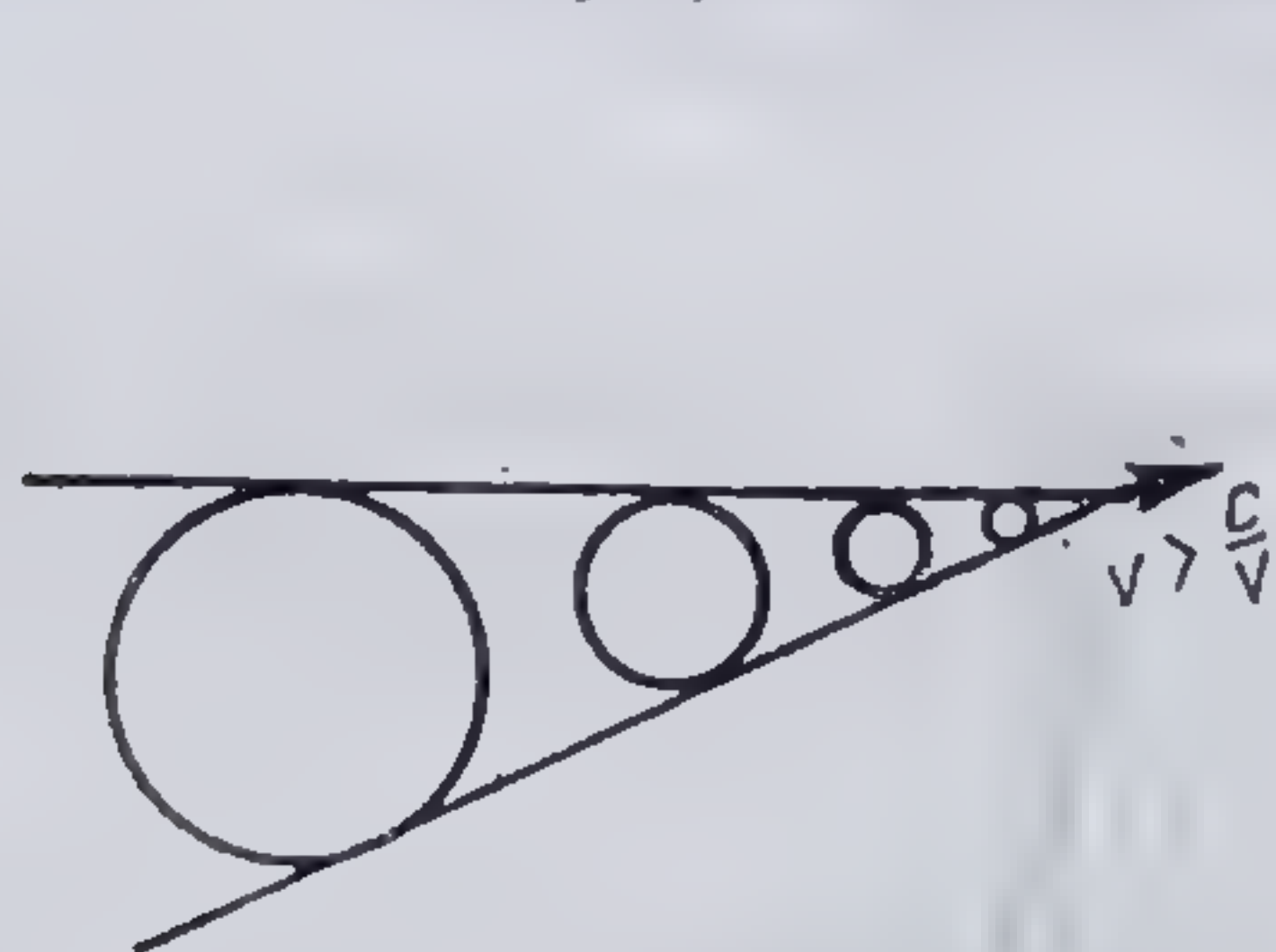


Fig. 12.8.2

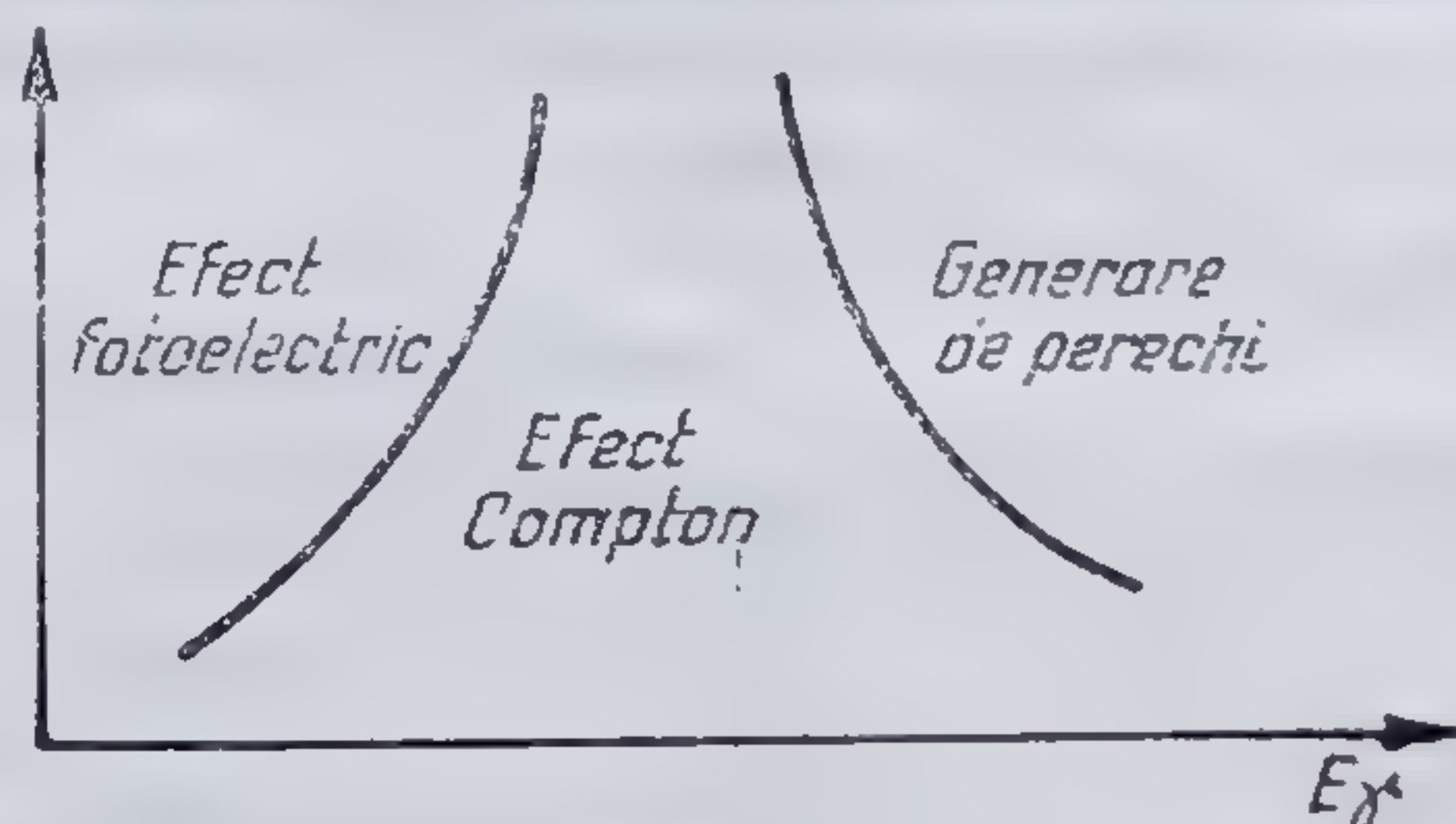


Fig. 12.8.3

Unor legi de atenuare exponențială (deci fără parcurs) li se supun și radiațiile γ , în care caz intervin, funcție de energia cuantelor γ (vezi fig. 12.8.3), procese elementare de tipul efectului fotoelectric, efectul Compton și generări de perechi. Un interesant tip de interacție a radiațiilor γ cu mediile solide îl reprezintă și *efectul Mössbauer*.

Un deosebit interes prezintă interacțiile cu substanța ale neutronilor și, în general, ale tuturor particulelor neutre din punct de vedere electric, deoarece pentru aceste particule nucleee atomice nu prezintă bariere repulsive de potențial și de aceea ele, împreună cu radiațiile γ , posedă o mare putere de penetrație. Unele dintre procesele de interacție menționate sînt importante pentru obținerea reacției de fisiune nucleară în lanț, așa cum este împrăștierea neutronilor pe nucleee ușoare (apă, apă grea, grafit etc.), care produce o „termalizare” a neutronilor rapizi. În felul acesta, pe lângă creșterea secțiunii de reacție cu scăderea vitezei, potrivit relației (12.6.50), mai intervin și capturi de rezonanță, descrise de formula Breit-Wigner (12.6.48), pentru neutronii termici o mare secțiune de captură avînd borul, cadmiul și hafniul.

2. Efectul Mössbauer reprezintă un mod rezonant de interacție al radiațiilor γ -monocromatice cu nucleee încastrate rigid într-o structură solidă. Acest efect a fost descoperit în anul 1958 de către L. R. Mössbauer (premiul Nobel, 1961) prin studii de absorbție a radiațiilor γ monoenergetice emise de un preparat radioactiv cristalin, într-o probă metalică, funcție de temperatura T . S-a constatat că prin scăderea temperaturii intervine, la un moment dat, o absorbție rezonantă (fig. 12.8.4). Astăzi se știe că efectul Mössbauer apare atunci cînd atît nucleul emițător cît și cel absorbant posedă același interval energetic al primului nivel excitat față de nivelul fundamental și în plus cele două nucleee sînt rigidizate într-o structură solidă. În aceste condiții, datorită faptului că impulsul de recul al nucleului emisiv și al celui absorbant sînt preluate de către întreaga structură a solidului, sub formă de impuls fononic total, va interveni o emisie și o absorbție de cuante gama fără recul, ceea ce va face ca liniile de emisie să se suprapună aproape perfect peste cele de absorbție, așa cum se indică pe schița din figura 12.8.5, iar absorbția cuantei emise va fi practic totală (rezonantă).

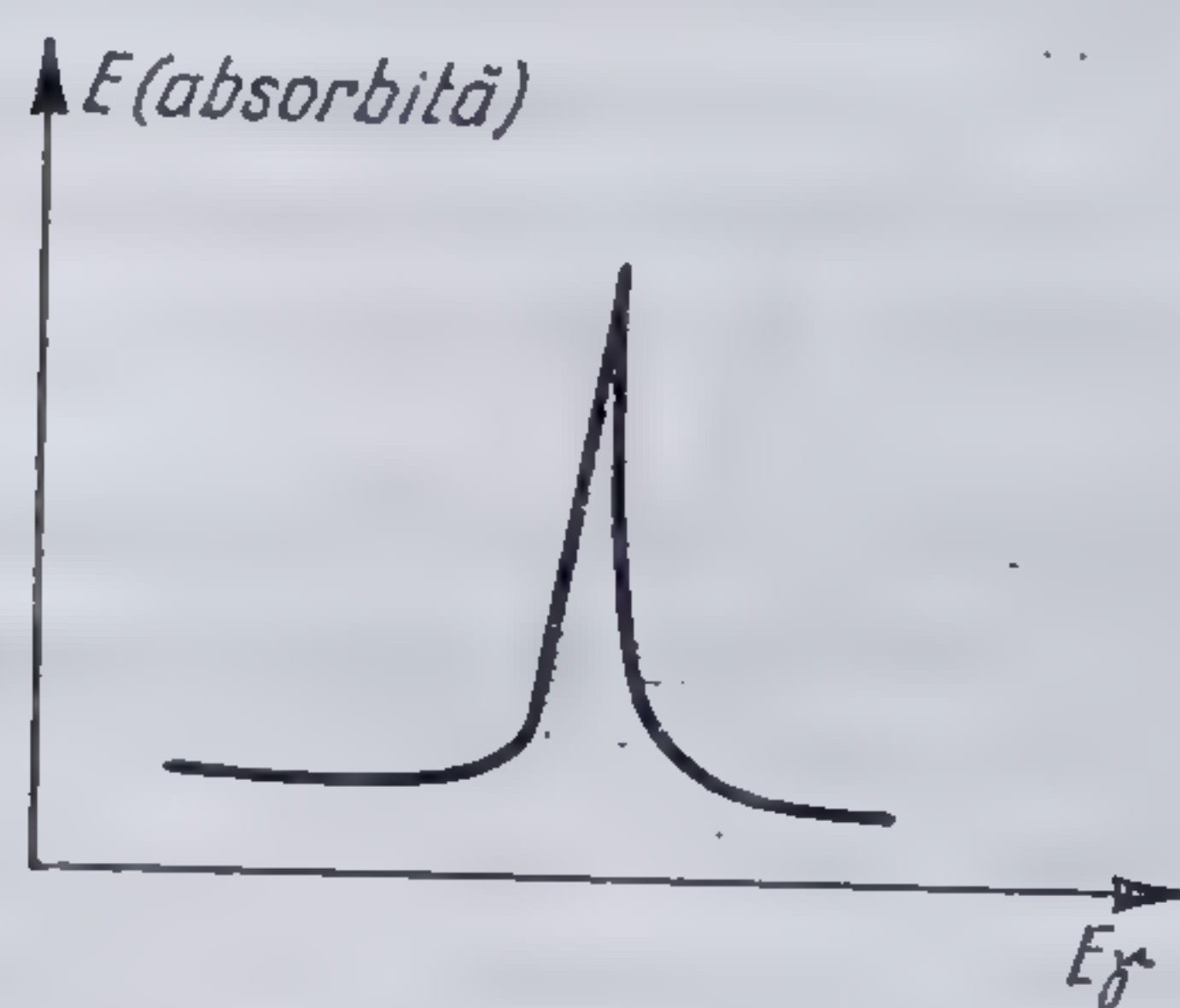


Fig. 12.8.4

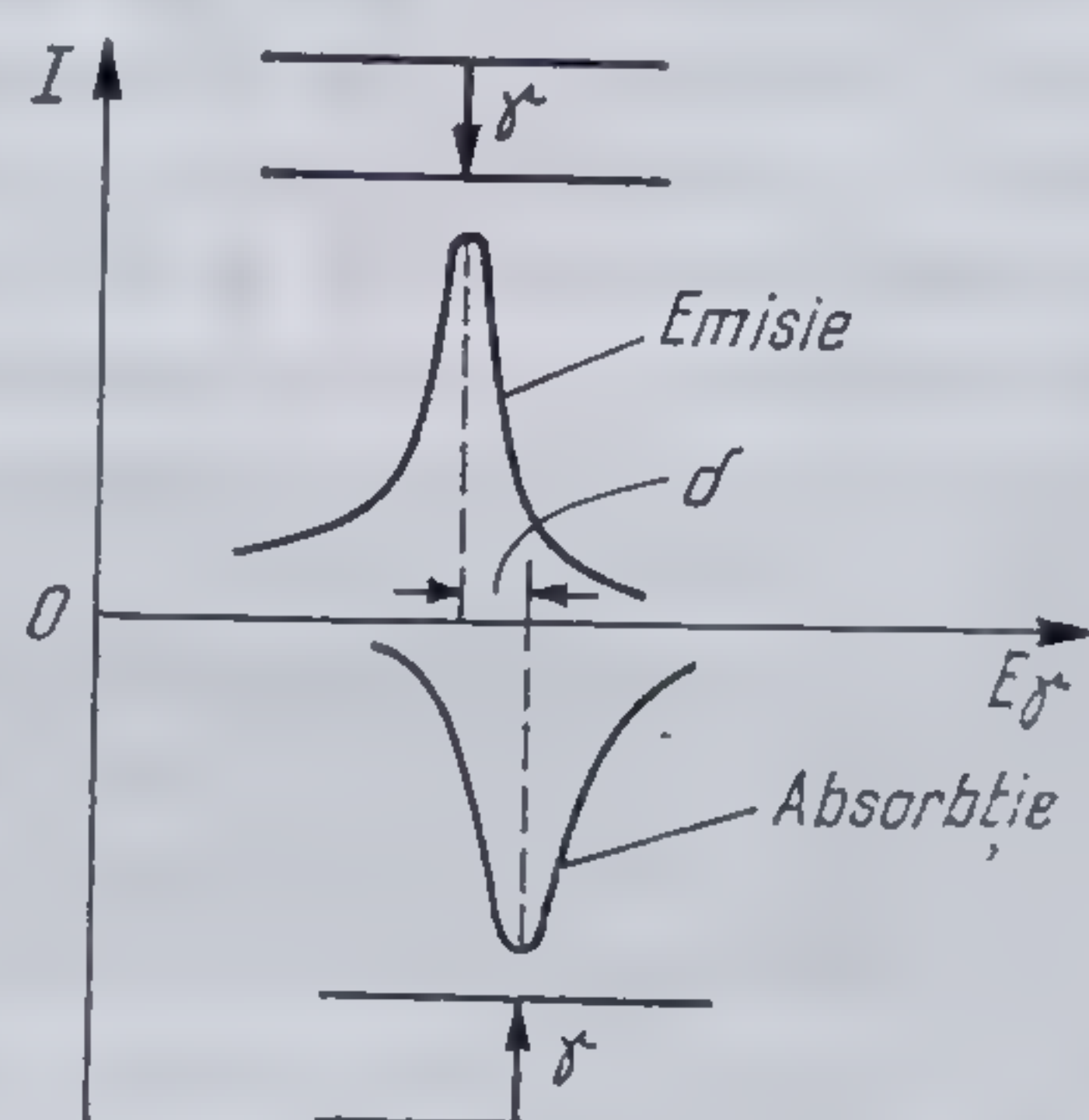


Fig. 12.8.5

Mica deplasare d , denumită *deplasare izomeră*, se datorește diferenței produse de interacțiile celor două nucleee cu vecinătățile lor electronice din proba emițătoare de cuante γ , denumită *emitor*, respectiv din cea absorbantă, denumită *absorber*. Această deplasare este de ordinul de mărime al

deplasărilor produse prin efect Doppler, dacă emițătorul sau absorbantul se deplasează cu viteze relative de ordinul milimetrilor pe secundă. De altfel, întregul spectru Mössbauer se înregistrează desfășurat prin efect Doppler (fig. 12.8.6), dând de regulă emițătorului o anumită mișcare de vibrație.

Au fost realizate astfel spectrometre Mössbauer, cele mai răspândite fiind cele cu emițător de ^{57}Co metalic radioactiv, care în urma unor capturi K ,

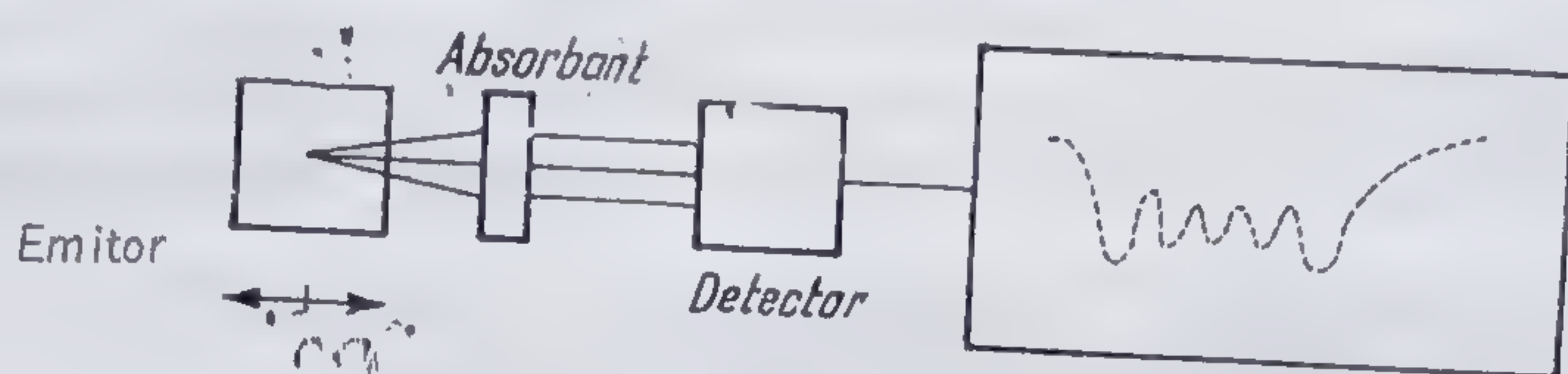


Fig. 12.8.6

emite cuante γ monocromatice, cu $E_\gamma = 14,4 \text{ keV}$ și trece în izotopul ^{57}Fe , aflat în stare fundamentală. Înseamnă că nucleul ^{57}Fe va fi un nucleu de „tip Mössbauer”, în sensul că probele în care el este prezent vor putea fi studiate prin efect Mössbauer. Există aproximativ 43 de izotopi capabili să producă efect Mössbauer, de interes sporit bucurându-se, în afară de ^{57}Fe , și ^{119}Sn , ^{191}Ir , etc.

Este interesant de observat că, dată fiind puterea mare de rezoluție a acestui efect (factor de calitate $Q_c = 3 \cdot 10^{12}$), care face posibilă evidențierea multora dintre interacțiile nucleului cu vecinătatea sa electronică de la nivel atomic sau al structurii cristaline, înseamnă că un nucleu Mössbauer va constitui o adevărată „probă microscopică” pentru studiul respectivelor interacții. Așa, de exemplu, o distribuție puțin asimetrică a electronilor s din atom (cei mai apropiați de nucleu) va crea un câmp electric cristalin cu gradient nenul, care va acționa asupra nucleului prin interacții cvadripolare (dacă $Q \neq 0$). Energia W_Q ce corespunde acestei interacții depinde de m_I , ceea ce înseamnă că în prezența ei vor apare despicări cvadripolare ale nivelelor nucleare și implicit ale liniilor de absorbție Mössbauer.

Intervin apoi despicări de tip Zeeman (vezi § 10.6) în câmpul magnetic $B(0)$, creat de electroni în nucleu, precum și o serie de deplasări sau structuri ale spectrelor Mössbauer produse de schimbări în stările de valență sau ale structurii cristaline ale absorbantului. Toate aceste procese pot fi evidențiate și studiate prin efect Mössbauer și, de aceea, acest efect și-a câștigat meritul de a fi una dintre cele mai precise metode de studiu a unor probleme de fizică nucleară, fizica solidului, chimie, mineralogie, metalurgie etc. Detalii asupra acestei interesante probleme pot fi găsite în tratatul profesorului D. Barb [4].

3. Interacția radiațiilor nucleare cu materia vie. Cu toate că procesele elementare de interacție ale radiației nucleare cu materia vie sînt aceleași ca și cele din cazul materiei fizice obișnuite, în organismele vii aceste pro-

cese sînt întotdeauna însoțite de o serie de *efecte biologice* specifice, care constau în modificări, uneori radicale, ale structurii și funcționalității organismului (mutații genetice, modificarea numărului globulelor sanguine, apariția cancerului etc.). Aceste modificări sînt produse de radicalii liberi care apar sub acțiunea ionizantă a radiațiilor nucleare și care conduc la formarea unor substanțe puternic oxidante ce pot altera și chiar distruge funcționalitatea metabolismului celular.

Studiul respectivelor procese secundare prezintă un interes deosebit, deoarece de acțiunea directă sau indirectă a radiațiilor nucleare asupra substanțelor vii depind condițiile în care omul poate lucra într-un câmp de astfel de radiații. Acest studiu trebuie să plece de la două dintre caracteristicile de bază ale interacțiilor radiațiilor nucleare cu materia vie și anume: a) efectele inițiale produse nu sînt sesizate imediat de către organismul uman (nu dispunem de organe de simț specializate în detectarea radiațiilor nucleare); b) efectele biologice apar cu întârziere, cînd iradierea a fost produsă deja și, prin urmare, cînd nu se mai poate conta decît pe puterea de regenerare naturală a părților din organism iradiate. Trebuie luate în considerație atît posibilitatea unei iradieri directe a substanțelor de importanță vitală pentru organism (cum sînt proteinele), cît și acțiunea indirectă, produsă prin răspîndirea pe cale chimică și biochimică a radicalilor liberi generați de contactul, ingerarea sau inhalarea, urmate de răspîndirea și apoi localizarea unor radioizotopi în organism.

Pentru exprimarea efectelor biologice produse de radiațiile nucleare s-a definit un sistem radiobiologic de mărimi și unități, mărimile fundamentale fiind *doza de radiație absorbită* D , definită prin energia absorbită de unitatea de masă de țesut viu

$$D = \frac{W}{m} \quad (12.8.7)$$

și *doza biologică* B , definită prin expresia

$$B = \eta D \quad (12.8.8)$$

în care coeficientul η exprimă *efectivitatea biologică relativă*, respectiv raportul dintre energia minimă pe care o lasă într-un țesut o radiație standard de 200 keV și energia respectivei radiații, pentru a se produce un efect biologic sesizabil clinic. S-a constatat că $\eta = 1$ pentru electroni, $\eta = 5$ pentru neutroni termici, $\eta = 10$ pentru protoni și neutroni rapizi și $\eta = 20$ pentru particule α .

Unitatea de măsură pentru doza de radiație este gray-ul ($1 \text{ Gy} = 1 \text{ J/kg}$, dar uzual de folosește radul ($1 \text{ rad} = 10^{-2} \text{ Gy}$), iar pentru doza biologică este sivertul, dar uzual se folosește remul ($1 \text{ rem} = 10^{-2} \text{ Sv}$).

Adesea se folosește și noțiunea de *debit al dozei biologice*

$$b = \frac{B}{t} \quad (12.8.9)$$

Imediat după descoperirea radiațiilor X a fost definit sistemul de mărimi și unități *roentgenologic*, care conține ca mărimi fundamentale *doza de ioni* Δ și *debitul dozei de ioni* δ , definite prin

$$\Delta = \frac{Q}{m}; \quad \delta = \frac{\Delta}{t} \quad (12.8.10)$$

Q reprezentând sarcina electrică de un anumit semn pe care o creează radiația în unitatea de masă a mediului. Doza de ioni se exprimă în roentgeni (r) — un roentgen reprezentând doza de ioni care crează o sarcină $Q = 1.3 \cdot 10^{-9} \text{C}$ în $1,293 \cdot 10^{-6} \text{kg}$ de aer.

4. **Protecția contra radiațiilor nucleare.** În realizarea protecției contra radiațiilor nucleare se pleacă de la constatarea că efectele biologice produse de aceste radiații pot fi atât efecte cu prag, cât și efecte fără prag. În primele, sînt afectate țesuturi care, la iradieri pînă la o anumită doză biologică maximă B_{max} , își pot regenera celulele distruse, iar cele din a doua categorie se referă la procesele care afectează celulele care nu au capacitate de regenerare, cum sînt celulele nervoase sau genele. Din prima clasă, cele mai sensibile sînt organele sistemului circulator, splina, șira spinării, sistemul limfatic și pielea.

Doza biologică maximă admisibilă este fixată, pentru o perioadă de 58 de ani, la valoarea de $2 \text{ Sv} = 200 \text{ rem}$. Pentru o persoană în vîrstă de N ani această doză biologică maximă va fi dată atunci de relația

$$B_{max} = 5(N - 18) [\text{rem}]. \quad (12.8.11)$$

Există de asemenea normative care fixează debitul maxim al dozei biologice admisibile pentru diverse porțiuni ale organismului uman, precum și pentru diverse zone ale unui teritoriu, funcție de gradul de calificare și de conștientizare al personalului și de ritmicitatea controlului ce se face [18].

Rezultă, din cele de mai sus, necesitatea de a proteja prin structuri de protecție orice sursă de radiații nucleare, în așa fel încît în afara acestor structuri doza biologică să nu depășească doza maximă admisibilă. Raportul

$$K = \frac{B}{B_{max}} \quad (12.8.12)$$

reprezintă *factorul de reducere* al structurii de protecție. Dacă în aceste structuri de materiale absorbante intervine o atenuare fără parcurs, de forma $I = I_0 e^{-\mu x}$, atunci acest factor poate fi calculat cu ajutorul relației

$$K = \frac{\eta}{100 B_{max}} \frac{dW}{dx} = \frac{\eta \mu I t}{100 B_{max} \rho} [\text{rem}]. \quad (12.8.13)$$

În cazul unei surse punctiforme, de activitate Λ , se va obține

$$K = \frac{\eta \mu \Lambda w S t}{4\pi \cdot 100 B_{max} \rho x} [\text{rem}] \quad (12.8.14)$$

iar pentru radiațiile cu un parcurs R

$$K = \frac{\eta It}{100 B_{max} \rho R} \text{ [rem]}. \quad (12.8.15)$$

Dacă se aleg Z straturi de grosime egală cu grosimea de înjumătățire $d_{1/2}$ atunci acest număr va fi dat de relația

$$Z = \log_2 K = 3,22 \cdot \log_{10} K. \quad (12.8.16)$$

Că materiale de protecție se folosesc : plumbul ($d_{1/2} = 0,068$ cm), betonul ($d_{1/2} = 0,2$ cm), oțelul ($d_{1/2} = 0,28$ cm) etc., pentru radiații foarte penetrante și bachelita, aluminiul, plexiglasul, în cazul celorlalte radiații.

§ 12.9. ENERGIA NUCLEARĂ

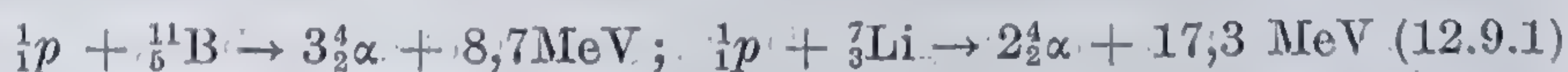
Descoperirea energiei nucleare a deschis noi perspective rezolvării uneia dintre cele mai grele probleme care a frământat omenirea în decursul ultimelor decenii și anume problema surselor de energie. Această problemă a devenit acută odată cu apariția crizei energetice, generată de trecerea masivă a economiei mondiale pe utilizarea intensivă a combustibililor fosili și îndeosebi a hidrocarburilor, care la un moment dat deveniseră foarte ieftine, pentru ca apoi prețul lor să crească vertiginos.

Desigur că orice reacție nucleară exoenergetică este o sursă generatoare de energie, dar din punct de vedere propriu-zis energetic prezintă interes numai acele procese nucleare exoenergetice care pot fi declanșate la scară macroscopică, se pot desfășura apoi în mod controlat și care dispun pe Pământ de însemnate rezerve de „combustibil nuclear”. Două procese nucleare sînt utile din acest punct de vedere și anume :

— *reacția de fisiune a nucleelor grele*, care în anumite condiții poate fi desfășurată la scară macroscopică și în regim controlabil;

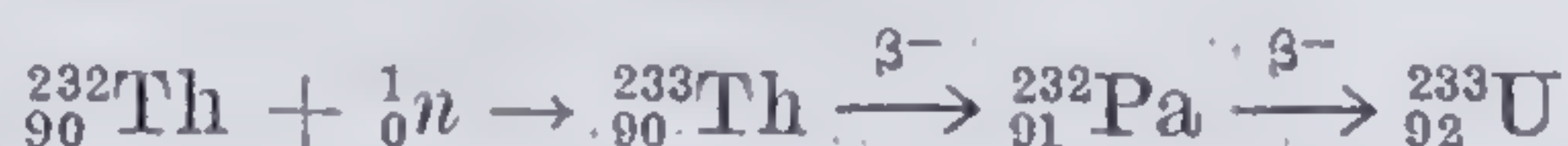
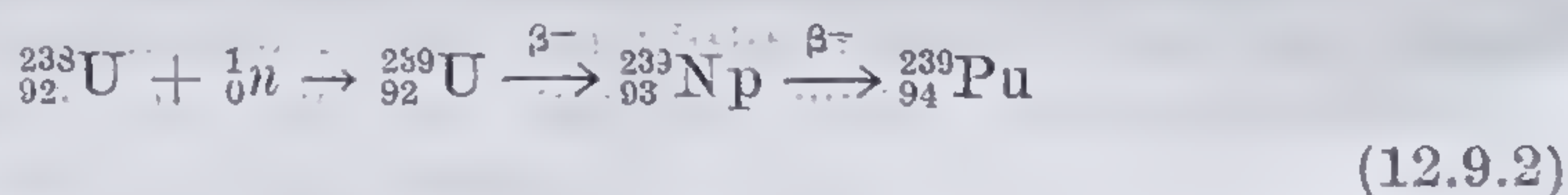
— *reacția de fuziune a nucleelor ușoare*, care de asemenea poate fi declanșată la scară macroscopică, sub formă de fuziune termonucleară într-o plasmă fierbinte. Aceste două reacții nucleare pot constitui surse de bază pentru generatoare de energie nucleară de mare putere.

De menționat că în calitate de surse de energie de puteri mai mici pot fi și sînt utilizate și alte procese nucleare ca : a) procesele de fisiune ale unor nuclee ușoare, cum sînt de exemplu procesele



care se bucură de calitatea de a nu genera produse radioactive (sînt surse de energie nepoluante) și b) procesele de dezintegrare radioactivă ale unor radioizotopi cu viață lungă, cum este cazul $^{238}_{94}\text{Pu}$, izotop α -activ cu $T_{1/2} = 92$ ani, din care s-a realizat o sursă cu puterea de 63 W, care a fost plasată pe Lună în cadrul misiunii „Apollo 12”. Astăzi, astfel de surse, alături de utilizarea izotopilor stabili și radioactivi, sînt privite adesea ca alcătuind a doua componentă a energiei nucleare.

1. **Obținerea energiei nucleare prin fisiune nucleară a nucleelor grele.** S-a văzut în §12.6 că deoarece în procesele de fisiune ale nucleelor de $^{235}_{92}\text{U}$, sub acțiunea neutronilor termici se eliberează în medie 2,4 neutroni pe fiecare act elementar, există posibilitatea declanșării în lanț a unei astfel de reacții. Calea de urmat a fost preconizată de către F. Joliot-Curie și realizată pentru prima dată de către E. Fermi, care, împreună cu B. Pontecorvo, construiește în anul 1942 — sub tribunele stadionului din Chicago — prima instalație, denumită ulterior *reactor nuclear*, în care urma să se declanșeze o reacție de fisiune în lanț controlată. Urmează la scurt interval de timp reactorul nuclear construit de către I. V. Kurceatov la Moscova (1946) și cel construit de Joliot-Curie la Paris (1948). În țara noastră primul reactor nuclear, destinat cercetărilor (de construcție sovietică), a intrat în funcțiune în anul 1957. Ulterior au fost descoperite căile de realizare ale reacțiilor de fisiune în lanț cu neutroni rapizi, pentru care se dispune de o rezervă mult mai însemnată de „combustibil nuclear”. Astfel, 99,3 % din uraniul natural pur îl constituie izotopul $^{238}_{92}\text{U}$, care fisionează numai sub acțiunea neutronilor rapizi. În plus, prin reacții de tipul :



care se pot desfășura într-un reactor nuclear cu neutroni rapizi, se regenerează combustibil nuclear pentru un reactor cu neutroni termici (respectiv $^{239}_{94}\text{Pu}$ și $^{233}_{92}\text{U}$).

Astăzi există în funcțiune o mare diversitate de reactori nucleari care sînt utilizați în cercetare, în producerea de radioizotopi și de energie în centralele nucleare-electrice (CNE). Aspecte de detaliu privind proiectarea, realizarea și funcționarea în condiții de eficiență și de securitate a reactorilor nucleari sînt expuse în tratate de specialitate [22, 99, 126]. Noi vom prezenta doar cîteva probleme legate de funcționarea celor două tipuri de reactori nucleari bazați pe fisiunea nucleelor grele.

În reactorul cu neutroni termici (fig.12.9.1), pentru întreținerea și dezvoltarea reacției de fisiune în lanț, neutronii rapizi rezultați direct din fisiune sînt supuși unui proces de *moderare*, prin care energia lor inițială de 1—2 MeV este redusă, prin intermediul unor ciocniri elastice cu nucleele ușoare ale moderatorului, pînă la valori de ordinul a 0,026 eV. Se folosesc în acest scop de obicei medii condensate, constituite din elemente ușoare, cum sînt apa, apa grea (D_2O), grafitul etc. De observat că se poate calcula relativ ușor numărul N de ciocniri pe care trebuie să le efectueze un neutron rapid cu nucleele moderatorului pentru a deveni neutron termic, capabil să producă noi acte de fisiune. Dacă în urma unei astfel de ciocniri, neutronul pierde $\Delta T = T_2 - T_1$ din energia cinetică, atunci după N ciocniri energia lui scade la valoarea

$$T_f = T_0 \left(\frac{T_1}{T_2} \right)^N = \theta^N T_0 \quad (12.9.3)$$

Luând pentru $T_0 = 2 \text{ MeV}$ și $T_f = 0,026 \text{ eV}$, rezultă că vor fi necesare

$$N = \frac{18,2}{0} \quad (12.9.4)$$

cioeniri pentru „termalizarea” respectivului neutron. Mărimea 0 este desigur specifică fiecărui tip de moderator. De exemplu, în parafină un neu-

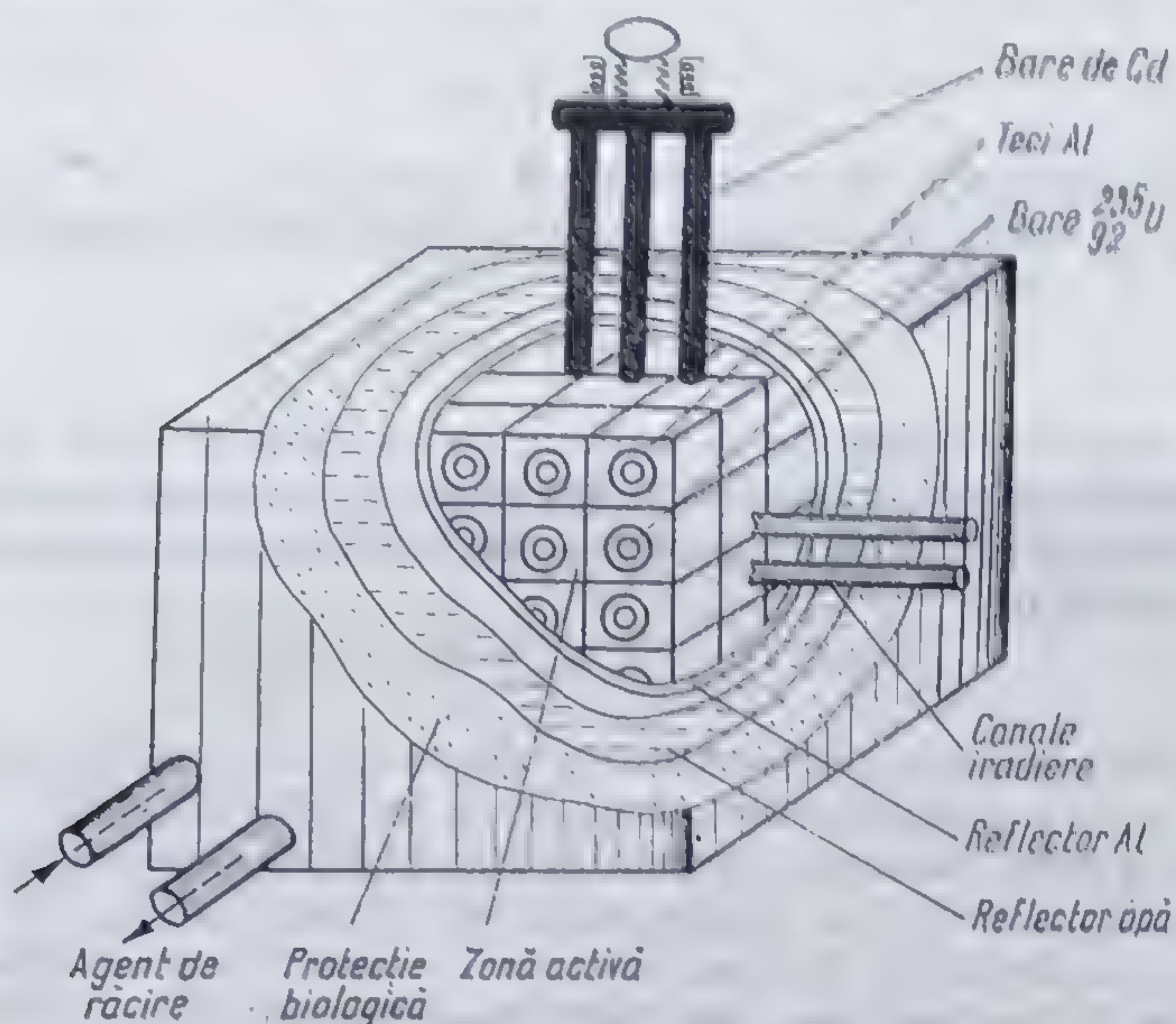


Fig. 12.9.1

tron cu $T_0 = 1 \text{ MeV}$ se termalizează după străbaterea unui drum de numai 4 cm, dar în grafit are nevoie de un drum de aproximativ 35 cm.

Zona din reactor în care se găsește combustibilul nuclear împreună cu moderatorul reprezintă *zona activă a reactorului*. În această zonă se asigură condițiile necesare pentru declanșarea unei reacții de fisiune în lanț și de dezvoltare a ei într-un regim controlat. Unul dintre parametrii cu care se poate descrie regimul de dezvoltare a reacției de fisiune în lanț este *coeficientul de multiplicare* k . El se definește prin raportul dintre numărul de neutroni produși într-o generație și numărul de neutroni din generația imediat precedentă, adică

$$k = \frac{N_t}{N_{t-1}} \quad (12.9.5)$$

O reacție în lanț se va desfășura în regim staționar pentru $k = 1$. În reactorii generatori de energie va trebui ca factorul k să fie menținut ușor supraunitar. Pentru $k \gg 1$, reacția de fisiune în lanț se desfășoară exploziv.

Experimental s-a demonstrat că factorul k depinde de mai mulți parametri, patru dintre aceștia fiind principali și anume:

a) α_0 — probabilitatea ca un neutron rapid să producă fisiunea nucleului de $^{235}_{92}\text{U}$ (factorul de fisiune rapidă);

b) p — probabilitatea de a se evita captura de rezonanță a neutronului cu energia de aproximativ 7 eV de către $^{238}_{92}\text{U}$;

c) f — probabilitatea fisionării nucleelor de $^{235}_{92}\text{U}$ sub acțiunea neutronilor termici (factorul de utilizare termică);

d) η — numărul mediu de neutroni rapizi produși într-un act elementar de fisiune. În general

$$\eta = \frac{\nu \sigma_{nf}}{\sigma_{nf} + \sigma_{n\gamma}} \quad (12.9.6)$$

$\sigma_{n\gamma}$ fiind secțiunea eficace a capturii de rezonanță.

Pentru un mediu fisionabil constituit din uraniu natural pur, nelimitat spațial, se obține

$$k_{\infty} = \alpha_0 \cdot p \cdot f \cdot \eta < 1 \quad (12.9.7)$$

și, de aceea, reacția de fisiune în lanț nu se va autoîntreține într-un astfel de mediu. Dacă însă se folosește un moderator, iar zona activă este de dimensiuni geometrice finite, atunci pentru o anumită dimensiune critică, determinată de condiția

$$k_{\text{crit}} = k_{\infty} P \quad (12.9.8)$$

în care prin P s-a notat probabilitatea ca un neutron termic să nu depășească zona activă a reactorului, reacția se va autoîntreține.

Pentru a mări valoarea factorului k se utilizează atât procedeul îmbogățirii uraniului natural în componenta sa ușoară ($^{235}_{92}\text{U}$), cât și menținerea forțată a neutronilor în zona activă. În acest scop se folosește *reflectorul* — un strat realizat din elemente ușoare, cum sînt beriliul, grafitul, apa, apa grea etc., care înconjoară zona activă. În felul acesta neutronii, care altfel ar zbura spre exteriorul zonei active, sînt reîntorși din nou în această zonă. După reflector, spre exterior, este realizată protecția biologică împotriva radiațiilor nucleare, formată dintr-un strat gros de beton, oțel [76], etc.

Una dintre problemele de mare însemnătate în funcționarea și conducerea unui reactor nuclear o constituie cunoașterea fluxului de neutroni din reactor. Cu toate că problema calculării acestui flux este destul de complexă [126], ea vizînd de fapt studiul comportării unui flux de neutroni nemonoenergetici în medii difuzante, absorbante, reflectătoare și multiplicatoare, astăzi acest calcul se face cu un ridicat grad de precizie, pentru diverse tipuri de reactori și diverse forme geometrice ale acestora. Un rol important în acest calcul revine desigur modului de așezare relativă a combustibilului nuclear și a moderatorului, dar și *sistemului de răcire*, care cuprinde de regulă două circuite de răcire, cu fluide de răcire (lichide sau metale ușoare topite), unul dintre ele fiind cel ce trece prin zona activă a reactorului și deci influențează în anumite cazuri și fluxul de neutroni. Acest fluid primar, ce devine radioactiv, preia energia din zona activă sub formă de căldură și o transferă apoi, prin intermediul unui schimbător de căldură, unui circuit secundar (neradioactiv), iar acesta o cedează utilizatorului — grupul turbogenerator al CNE.

Astăzi există în funcțiune reactori nucleari de tip CANDU cu combustibil nuclear realizat din uraniu natural pur (99,3 % $^{238}_{92}\text{U}$; 0,7 % $^{235}_{92}\text{U}$), reactori cu uraniu îmbogățit pînă la 10 % în $^{235}_{92}\text{U}$, reactori cu neutroni rapizi regeneratori, fără moderatori etc. Clasele de reactori nucleari se pot distinge în funcție de tipul combustibilului nuclear, de cel al moderatorului și al agentului de răcire. Există *reactori eterogeni* în care combustibilul nuclear este în stare solidă, iar moderatorul și agentul de răcire sînt lichide și *reactori omogeni*, cu combustibil nuclear fie dizolvat în moderatorul lichid, fie dispersat omogen într-un material ceramic de tip cermet.

În continuare vom prezenta un model de calcul al fluxului de neutroni dintr-un reactor nuclear cu zonă activă de formă sferică, în care se neglijează procesele de reflexie ale neutronilor. Ecuația cinetică pentru variația în timp a numărului de neutroni n , din unitatea de volum, va fi de forma

$$\frac{dn}{dt} = (k - 1)n + \nabla \cdot (D \nabla n). \quad (12.9.9)$$

Pentru un regim staționar ($dn/dt = 0$) și o simetrie sferică ($n = n(r)$) această ecuație se reduce la forma

$$\frac{d^2 n}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dn}{dr} + \alpha^2 n = 0 \quad (12.9.10)$$

în care s-a folosit notația

$$\alpha^2 = \frac{k - 1}{D}. \quad (12.9.11)$$

O soluție pentru ecuația (12.9.10) se obține imediat, dacă se face substituția $n(r) = N(r) \cdot r$, care o reduce la forma ecuației diferențiale a oscilatorului armonic

$$\frac{d^2 N(r)}{dr^2} + \alpha^2 N(r) = 0 \quad (12.9.12)$$

și deci

$$n(r) = \frac{A}{r} \sin(\alpha \cdot r). \quad (12.9.13)$$

Desigur o astfel de soluție ne oferă numai o descriere calitativă a variației fluxului de neutroni din reactor. Cu toate acestea, se poate observa că soluția (12.9.13) pune în evidență existența unei *dimensiuni critice* pentru zona activă, dimensiune care derivă din condiția ca pe suprafața zonei active să fie satisfăcută condiția $n(r_{critic}) = 0$. Cu această condiție, din (12.9.13), rezultă

$$r_{critic} = \frac{\pi}{\alpha} = \pi \sqrt{\frac{D}{k - 1}} \quad (12.9.14)$$

De remarcă că dimensiunea critică a zonei active va fi cu atât mai mare cu cât valoarea lui k este mai apropiată de unitate. Din această pricină, starea critică a unui reactor nuclear se exprimă nu numai prin dimensiune, respectiv prin masă critică, ci și prin raportul

$$\rho = \frac{k - 1}{k} \quad (12.9.15)$$

denumit *reactivitate* a reactorului. Starea critică va fi în acest caz atinsă atunci când $\rho = 0$.

La un flux mediu $\langle n \rangle$ de neutroni, într-o zonă activă de volum V , a cărei secțiune macroscopică de fisiune este Σ_f , se obține o putere [128]

$$P = \frac{1}{3,1 \cdot 10^{10}} \Sigma_f V \langle n \rangle. \quad (12.9.16)$$

Această putere nu este convertibilă integral în putere electrică, în cadrul unei CNE, deoarece apar o serie de pierderi de putere pe circuitele de schimb de căldură, iar turbina cu aburi are, la temperaturile ce se pot practica într-un reactor nuclear, un randament termic relativ scăzut, sub 40 %. Dar și în aceste condiții, producerea de energie electrică în cadrul CNE este avantajoasă, în lume existînd un număr de peste 200 CNE în funcțiune.

Date fiind rezervele mari de U și Th de pe Terra, estimate la $2,6 \cdot 10^9$ tcc (tone combustibil convențional) pentru uraniul din pămînt, $2,6 \cdot 10^{12}$ tcc pentru uraniul din mare și $1,3 \cdot 10^{12}$ tcc pentru toriu, în timp ce rezervele de combustibili clasici sînt de numai $8,6 \cdot 10^{12}$ tcc ($7,6 \cdot 10^{12}$ tcc cărbune, $0,6 \cdot 10^{12}$ tcc petrol și $0,4 \cdot 10^{12}$ tcc gaze naturale) rezultă importanța deosebită a utilizării acestei noi surse de energie. De aceea și țara noastră a început realizarea primei unități nucleare-electrice, care va avea în final puterea instalată de 3500 MW. Vor fi puse în funcțiune CNE pe bază de uraniu natural sau uraniu îmbogățit în componenta sa ușoară, dar în prezent se au în vedere și reactori cu neutroni rapizi, regeneratori de combustibil nuclear pentru reactorii cu neutroni termici. În felul acesta va spori gradul de ardere al combustibilului nuclear, de la 0,5 — 1,5 % cît este în reactorii termici, la 30 ÷ 80 %.

Principala caracteristică a unui reactor cu neutroni rapizi o reprezintă absența moderatorului. Zona lui activă este compusă din alte două zone și anume o *zonă centrală* formată din uraniu îmbogățit pînă la 15 — 20 % cu plutoniu, sau cu alți izotopi fisionabili sub acțiunea neutronilor termici, care formează așa numitele *materiale fisionabile (sau fisile)* și o *zonă periferică* formată din uraniu natural sau toriu, denumite *materiale fertile*. Acestea sînt realizate sub formă de pastile întecuite în bare de oțel inoxidabil, de o anumită geometrie, care formează un *blanket* de material fertil (fig. 12.9.2). Există un blanket axial și unul radial, în care se asigură un factor de reproducere de 1,1 ÷ 1,6.

Principiul de funcționare al unui reactor cu neutroni rapizi este următorul: în urma fisionării materialelor fisile din zona centrală ia naștere un puternic flux de neutroni rapizi. O parte dintre aceștia întrețin reacția nucleară în lanț în zona centrală, iar restul ajung la stratul de material fertil, în care, prin reacții de tipul (12.9.2), dau naștere la izotopi de tipul

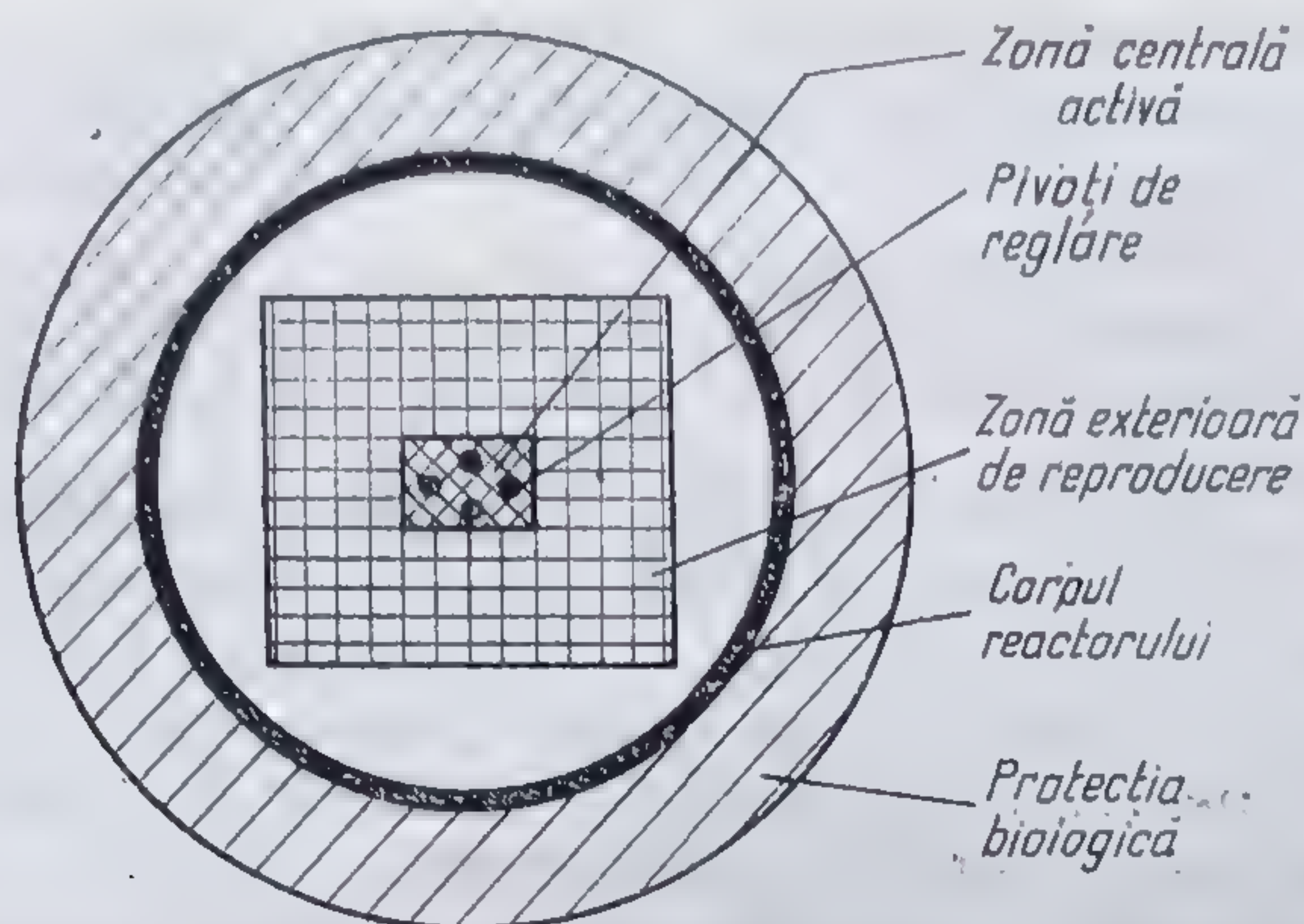


Fig. 12.9.2

^{239}Pu sau ^{233}U , existând și posibilitatea fisionării unor nuclee de ^{238}U sub acțiunea neutronilor rapizi.

Pentru îmbogățirea fluxului de neutroni rapizi se folosește un reflector, realizat dintr-un strat de Cu sau Ni, metale care reflectă elastic neutronii rapizi.

Regimul de funcționare al reactorului se stabilește cu ajutorul unor bare de reglare, realizate din material fertil (U sau Th), introduse atât în zona activă cât și în zona de reproducere.

Reacția încetează la îndepărtarea acestor bare din reactor, dar, în general, reactorii cu neutroni rapizi se conduc în condiții mai grele decât cei termici.

Ca agent de răcire se folosește sodiul sau alte metale ușoare topite, care pot asigura un transport de căldură de pînă la 1000 kW/l [126].

2. Obținerea energiei nucleare prin fuziune termonucleară. Eforturile depuse cu tot mai mare insistență în ultima vreme pentru a obține energie pe seama reacțiilor de fuziune termonucleară [1] a nucleelor ușoare de deuteriu și tritium sînt justificate nu numai de presiunea crizei energetice mondiale, ci mai ales de rezerva imensă de combustibil nuclear pentru astfel de reacții de care dispune Terra.

Astfel, într-un litru de apă de mare se găsește atât deuteriu încît energia pe care ar furniza-o într-o reacție de fuziune termonucleară (de tip $^2_1\text{d} + ^2_1\text{d}$; vezi (12.6.54)) ar fi echivalentă cu energia ce se obține prin arderea a 100 litri de benzină.

Dar reacția $^2_1\text{d} + ^2_1\text{d}$ se desfășoară în proporții de masă numai la temperaturi de circa 10 ori mai ridicate decât temperatura la care se produce reacția $^2_1\text{d} + ^3_1\text{t}$, putînd ajunge la valori de ordinul $T \approx 10^9$ K.

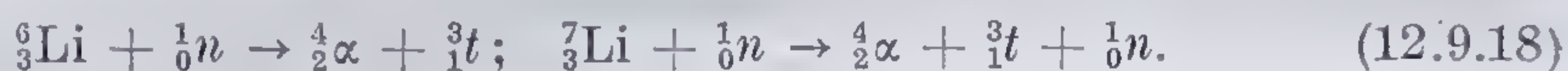
O a doua condiție pentru declanșarea și autoîntreținerea unei reacții de fuziune termonucleară este dată de așa-numitul „criteriul Lawson”, formulat de către J. D. Lawson în anul 1957. Acest criteriu stabilește că la $T \geq T_{fuz}$ trebuie să fie îndeplinită și condiția :

$$n\tau \geq (n\tau)_{min} \quad (12.9.17)$$

pentru ca reacția să se autoîntrețină. În această condiție, n reprezintă concentrația volumică a nucleelor supuse fuziunii termonucleare, iar τ este timpul în care plasma fierbinte, aflată la temperatura T_{fuz} , își menține stabilitatea termodinamică.

Astăzi se estimează că pentru cele două reacții de fuziune (${}^2_1d + {}^2_1d$), respectiv (${}^2_1d + {}^3_1t$), valorile lui $(n\tau)_{min}$ sînt de $2 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}$, respectiv $6 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}$.

De notat că, din ambele puncte de vedere, condițiile de producere ale reacției de fuziune termonucleară (${}^2_1d + {}^3_1t$) sînt net avantajoase în raport cu cele privitoare la reacția (${}^2_1d + {}^2_1d$). Din acest motiv, la ora actuală este abordată ca sursă probabilă de energie numai reacția de fuziune (${}^2_1d + {}^3_1t$), cu toate că pentru această reacție rezervele de combustibil nuclear sînt relativ sărace; pe Pămînt nu există rezerve de tritium (3_1t), aceste nuclee obținîndu-se din reacțiile pe care le produc neutronii asupra litiului :



Dar și rezervele de litiu de care dispune Terra sînt limitate, prognozele prevăzînd o cantitate care, la actualul consum de energie, s-ar epuiza în aproximativ 10^4 ani. Rezervele de deuteriu sînt practic nepuizabile, dar stadiul actual al cercetărilor privind declanșarea și desfășurarea în condiții controlate a unei reacții de fuziune termonucleară (${}^2_1d + {}^2_1d$) nu oferă speranțe că într-un viitor apropiat această problemă va fi rezolvată. De aceea, cînd vorbim de energie nucleară pe bază de reacție de fuziune termonucleară, avem de fapt în vedere reacția (${}^2_1d + {}^3_1t$).

Prin urmare, prima condiție ca o reacție de fuziune termonucleară să poată fi declanșată în proporție de masă este ca mediul fluid de ${}^2_1d + {}^3_1t$ să fie adus la o temperatură de aproximativ 10^8 K . În aceste condiții se obține o plasmă fierbinte în care electronii se separă de nuclee, formînd de regulă un subsistem termodinamic separat de cel al nucleelor. Există mai multe posibilități de a obține plasmă fierbîntă și anume :

1) prin descărcări electrice în amestecul gazos de (${}^2_1D + {}^3_1T$) și separarea plasmă de pereții incintei cu ajutorul cîmpului magnetic;

2) încălzirea unei plasmă deja formate, prin bombardare cu particule (accelerate) de mare energie;

3) prin iradierii cu fluxuri de radiație laser de mare putere ale unor particule de deuteriu de litiu etc.

Primele două procedee, ce presupun menținerea plasmă cu ajutorul cîmpurilor magnetice, se numesc „cu confinare magnetică”, în timp ce al treilea este cunoscut drept „confinare inerțială”.

De remarcat că ultimul procedeu este avantajos și din punct de vedere al criteriului Lawson, întrucît s-a constatat că prin iradierea con-

centrică a unei pastile de combustibil de fuziune se obține o „evaporare” superficială a acesteia, proces care prin efecte de reacție (evaporarea superficială este însoțită de o comprimare a plasmei) determină o creștere a concentrației volumice a plasmei.

Din clasa instalațiilor cu confinare magnetică s-au remarcat, în decursul timpului, instalațiile OGRA și ZETA, în care s-au obținut temperaturi de $T = 5 \cdot 10^6$ K în perioada 1955–1960 și instalațiile TOKAMAK în perioada următoare.

Performanțele cele mai bune le-au înregistrat instalațiile TOKAMAK în care s-au obținut plasmă de ($^2d + ^3t$) cu $T > 10^7$ K, $n \approx 8 \cdot 10^{16} \text{ m}^{-3}$ și $\tau = 0,06$ s, deci $(n\tau) = 4,8 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-3}\text{s}$. Acești parametri pot fi îmbunătățiți prin iradierii cu radiații laser de mare putere și dacă se vor putea realiza laseri în impulsuri, cu puteri de 10^3 ori mai mari decât cele pe care le putem construi astăzi (investigațiile sînt orientate îndeosebi asupra laserilor pe bază de neodim; vezi §10.4), atunci probabil vom putea dispune de o sursă de energie pe bază de fuziune termonucleară.

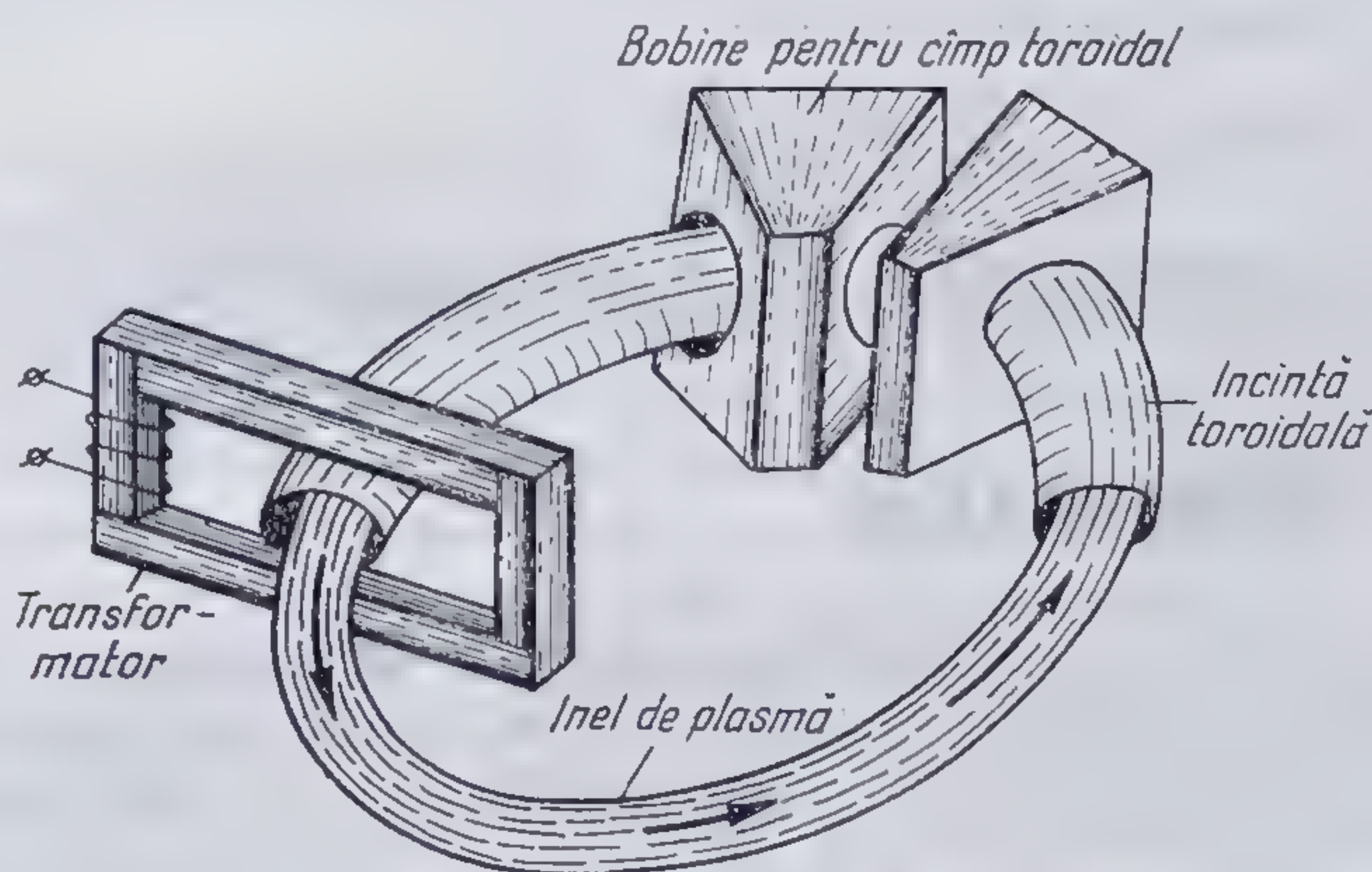


Fig. 12.9.3

O instalație de tip TOKAMAK (fig. 12.9.3) posedă o incintă toroidală în care plasma (realizată dintr-un amestec de deuteriu și tritium) este menținută în condiții de izolare față de pereții incintei. În acest scop se folosește un cîmp magnetic care creează presiuni mari la periferia incintei, realizînd astfel îndepărtarea plasmei fierbinți de pereții incintei. Acest proces de confinare conduce și la o creștere a presiunii în interiorul plasmei. Prin urmare, confinarea plasmei într-o instalație de tip TOKAMAK se realizează pe cale magnetică, prin intermediul cîmpului magnetic de inducție B , creat de piesele polare dispuse simetric în jurul incintei toroidale. Se obține astfel o plasmă de formă toroidală, cu secțiunea transversală mai mică decât a incintei, deci o plasmă confinată față de pereții acesteia. O astfel de plasmă poate fi ușor încălzită pe cale electrică. De exemplu, prin intermediul unui transformator, în care plasma toroidală constituie înfășurarea secundară a acestuia se pot induce în ea curenți de intensități foarte ridicate ($I_p \approx 1$ MA), care prin efect Joule transferă căldură plasmei. Plasma se încălzește datorită ciocnirilor coulombiene dintre electroni și

nucleele 2_1d și 3_1t , dar în același timp este supusă și unui proces de comprimare de către câmpul de inducție. Energia este preluată mai întâi de către electronii din plasmă, care deși interacționează foarte slab cu nucleele din plasmă (vezi §6.11) pot transfera treptat, prin ciocniri multiple, energia acestora.

Dar confinarea plasmei într-o instalație de tip TOKAMAK nu poate fi totală. Impurificarea plasmei de ($^2_1d + ^3_1t$) mai ales cu ioni grei, smulși din pereții incintei, produce o rapidă scădere a reacției de fuziune termonucleară. De aceea, există încă dificultăți destul de mari în realizarea unei surse de energie bazată pe reacția de fuziune termonucleară.

Se preconizează ca învelișul incintei de reacție să fie realizat dintr-un strat de litiu, în care neutronii din reacția de fuziune



să transfere energia de 14,1 MeV și în același timp să producă tritium. Energia transferată sub formă de căldură în acest înveliș urmează a fi utilizată în instalații clasice, de tip turbină.

§ 12.10. PARTICULE ELEMENTARE

12.10.1. INTRODUCERE

Noțiunea de particulă elementară este mai veche în fizică. Ea s-a format în strânsă legătură cu studiul structurii materiei, fiind privită aproape tot timpul ca particulă ultimă și indivizibilă, care ar sta la temelia tuturor corpurilor. Însăși denumirea de atom își are originea, așa cum s-a văzut în §9.1, în convingerea că la o anumită scară obiectele lumii materiale devin indivizibile.

La început, erau privite ca „elementare” particule relativ mari de materie, dar pe măsura acumulării cunoștințelor despre respectivele particule s-a constatat că de fapt ele posedă o structură destul de complexă și atunci atributul de elementar a fost transferat părților constitutive ale acestora. Concludentă din acest punct de vedere este percepția din secolele XVIII și XIX a noțiunii de elementaritate, când erau considerate drept particule elementare moleculele și atomii.

Secolul XX aduce informații noi cu privire la structura atomului și a moleculei, se descoperă nucleul atomic și structura sa nucleonică, etapa încheindu-se în cel de-al treilea deceniu.

Studiul radiațiilor nucleare, precum și al celor ce apar într-o serie de procese nucleare, produse fie de interacția radiației cosmice primare cu atmosfera terestră, fie de interacția particulelor accelerate în acceleratoarele de particule cu nucleul atomic sau cu alte particule, au evidențiat prezența unei game largi de noi particule (în număr de peste 200), majoritatea inexistente în condițiile naturale de pe Pământ.

Multe dintre aceste particule manifestă o comportare „ciudată” și posedă proprietăți cu totul noi, neîntâlnite la predecesoarele lor. Într-o astfel de situație, elementaritatea a fost trecută la această nouă generație de particule și pînă în deceniul al șaselea al secolului nostru se considerau drept elementare, protonul, electronul, neutronul, neutrinii, mezonii și barionii. Astăzi știm exact că multe dintre aceste particule au o structură destul de complexă și acceptăm că ne găsim în fața unei noi trepte a elementarității, constituită probabil numai din leptoni (electroni, miuoni, neutrini), quarci (sau partoni) și cuantele care realizează interacția dintre aceste particule : fotonii, gluonii, bosonii vectoriali intermediari W^\pm și gravitonii.

Urmărind această evoluție a conceptului de elementaritate ne putem da seama că, în general, în fiecare dintre etape se consideră drept elementar ceea ce în etapa imediat precedentă intra ca părți constitutive în vechile particule elementare. Pe baza acestui considerent am putea defini drept elementară particula a cărei structură încă nu o cunoaștem. Ea va trebui să poată fi caracterizată prin mărimi fizice specifice (masă, sarcină, spin, timp de viață etc.) și să fie localizabilă într-o regiune limitată a spațiului la un moment dat.

Este interesant de menționat că, deși fizica particulelor elementare are o istorie mai scurtă decît a altor domenii ale fizicii, aceasta este deja bogată în semnificații și într-o serie de realizări cruciale, care au determinat o sporire a interesului pentru acest domeniu de investigație științifică. Desigur, noile cuceriri ale cunoașterii umane nu s-au obținut ușor. Ele au fost condiționate, în bună măsură, de progresul tehnic și tehnologic al epocii, dar au și influențat la rîndul lor în mod favorabil acest progres.

În prezent fizica particulelor elementare, ca domeniu al cunoașterii proprietăților și comportamentului particulelor elementare, oferă un sistem articulat de concepte acreditate cu un înalt nivel de credibilitate. Cercetătorul din acest domeniu dispune, la ora actuală, de posibilități reale de a cerceta, a face măsurători, a formula ipoteze, a construi teorii și a le verifica, deci are posibilități de informare teoretică și experimentală activă, la nivelul respectiv de structură și comportament ale materiei.

Ierarhia de structuri ale materiei și condiționarea lor reciprocă este în bună măsură cunoscută. Dar, marea varietate a tipurilor de particule elementare existente astăzi și a proprietăților lor face dificilă, chiar și pentru un specialist în domeniu, elaborarea unei sistematice a lor. Dificultățile nu sînt legate numai de faptul că încă nu s-a dat o definiție atotcuprinzătoare particulelor elementare (considerarea lor ca exponenți ai nivelului ultim al cunoașterii, în privința structurii materiei, neputînd constitui o definiție). În primul rînd s-a constatat că unele dintre particulele pe care astăzi le includem în categoria de elementare (protonul, neutronul, mezonii, barionii etc.) posedă structuri foarte complexe, nu neapărat de tip ierarhic, adică guvernate de relația simplu-complex, ci mai degrabă de relația complex-complex. În al doilea rînd, s-a constatat că accesul la lumea particulelor elementare este legat de un mare număr de dificultăți, atît experimentale, cît și principiale, teoretice. La acest

nivel, conceptele uzuale din mecanica clasică, din electrodinamică și unele chiar din mecanica cuantică nerelativistă, nu-și mai păstrează valabilitatea, dimensiunile spațio-temporale fiind cele la care încep să acționeze relațiile de nedeterminare ale lui Heisenberg. Dealtfel, multe din interpretările date unor fapte experimentale se bazează tocmai pe aceste relații, așa cum s-a văzut și în § 12.5. De aceea și ideile și tehnicile matematice pe care se bazează modelele din fizica particulelor elementare sînt destul de complexe și în consecință nu vor putea fi expuse aici, decît sub o formă cu totul schematică.

Dificultățile experimentale sînt legate și de faptul că fenomenele din fizica particulelor elementare se produc la o altă scară energetică. Dealtfel, din punct de vedere energetic, se disting două moduri de comportament ale particulelor elementare și anume :

- a) la energii joase ($E < 1 \text{ GeV}$)
- b) la energii înalte ($E > 1 \text{ GeV}$).

Cu toate că și fenomenele din prima clasă prezintă interes, numai cele din a doua clasă corespund propriu-zis fizicii particulelor elementare. Informații despre particulele elementare se obțin, la asemenea energii, pe căi speciale, folosind aparatură experimentală foarte complicată și cu investiții mari de timp. Particulele elementare, de energii și tipuri dorite trebuie produse, de regulă, artificial, folosind fie acceleratoare de particule de mare putere, fie radiația cosmică. Dar, pentru ca rezultatele experimentale să devină semnificative, ele trebuie supuse unor prelucrări care necesită un volum imens de calcul, ce poate fi efectuat doar cu calculatoare electronice de mare putere.

Cu toate aceste dificultăți astăzi dispunem nu numai de o sistematică de certă valoare a particulelor elementare, făcută în funcție de caracteristicile intrinseci ale acestora (masă proprie m , sarcină electrică Q , spin I , izospin T , sarcină barionică B , număr leptonic L , stranietate S , hipersarcină Y^*), ci și de o clasificare a acestor particule pe grupuri mai mari, cum sînt gruparea fotonilor, a leptonilor și hadronilor. Aceste grupări se fac funcție de tipul interacțiilor la care pot participa respectivele particule. Astfel, fotonii participă la interacțiile electromagnetice, fiind de fapt cuantele care mediază o astfel de interacție, leptonii participă la interacția slabă, cei încărcăți putînd interacționa și electromagnetic, iar hadronii realizează între ei interacții tari, de tipul forțelor nucleare.

Studiul tipurilor de interacții dintre particulele elementare reprezintă astăzi una dintre posibilitățile reale de abordare nu numai a sistemicii particulelor elementare, ci și a teoriilor existente în acest interesant domeniu de investigație. De aceea, în următoarele două paragrafe, se va expune problematica interacțiilor fundamentale, în lumina cunoștințelor cîștigate pînă la ora actuală [22, 34, 85, 87].

* Pentru noțiunea de stranietate și de hipersarcină vezi § 12.10.6.

nivel, conceptele uzuale din mecanica clasică, din electrodinamică și unele chiar din mecanica cuantică nerelativistă, nu-și mai păstrează valabilitatea, dimensiunile spațio-temporale fiind cele la care încep să acționeze relațiile de nedeterminare ale lui Heisenberg. Dealtfel, multe din interpretările date unor fapte experimentale se bazează tocmai pe aceste relații, așa cum s-a văzut și în § 12.5. De aceea și ideile și tehnicile matematice pe care se bazează modelele din fizica particulelor elementare sînt destul de complexe și în consecință nu vor putea fi expuse aici, decît sub o formă cu totul schematică.

Dificultățile experimentale sînt legate și de faptul că fenomenele din fizica particulelor elementare se produc la o altă scară energetică. Dealtfel, din punct de vedere energetic, se disting două moduri de comportament ale particulelor elementare și anume :

- a) la energii joase ($E < 1 \text{ GeV}$)
- b) la energii înalte ($E > 1 \text{ GeV}$).

Cu toate că și fenomenele din prima clasă prezintă interes, numai cele din a doua clasă corespund propriu-zis fizicii particulelor elementare. Informații despre particulele elementare se obțin, la asemenea energii, pe căi speciale, folosind aparatură experimentală foarte complicată și cu investiții mari de timp. Particulele elementare, de energii și tipuri dorite trebuie produse, de regulă, artificial, folosind fie acceleratoare de particule de mare putere, fie radiația cosmică. Dar, pentru ca rezultatele experimentale să devină semnificative, ele trebuie supuse unor prelucrări care necesită un volum imens de calcul, ce poate fi efectuat doar cu calculatoare electronice de mare putere.

Cu toate aceste dificultăți astăzi dispunem nu numai de o sistematică de certă valoare a particulelor elementare, făcută în funcție de caracteristicile intrinseci ale acestora (masă proprie m , sarcină electrică Q , spin I , izospin T , sarcină barionică B , număr leptonic L , stranietate S , hipersarcină Y^*), ci și de o clasificare a acestor particule pe grupuri mai mari, cum sînt gruparea fotonilor, a leptonilor și hadronilor. Aceste grupări se fac funcție de tipul interacțiilor la care pot participa respectivele particule. Astfel, fotonii participă la interacțiile electromagnetice, fiind de fapt cuantele care mediază o astfel de interacție, leptonii participă la interacția slabă, cei încărcăți putînd interacționa și electromagnetic, iar hadronii realizează între ei interacții tari, de tipul forțelor nucleare.

Studiul tipurilor de interacții dintre particulele elementare reprezintă astăzi una dintre posibilitățile reale de abordare nu numai a sistematiei particulelor elementare, ci și a teoriilor existente în acest interesant domeniu de investigație. De aceea, în următoarele două paragrafe, se va expune problematica interacțiilor fundamentale, în lumina cunoștințelor cîștigate pînă la ora actuală [22, 34, 85, 87].

* Pentru noțiunea de stranietate și de hipersarcină vezi § 12.10.6.

12.10.2. TIPURI FUNDAMENTALE DE INTERACȚII ÎN NATURĂ

Studiind atent trecerea elementarității de la o treaptă la alta, descoperim o fascinantă structuralizare a materiei. Această structuralizare se pare că se realizează ierarhizat, pe nivele, fiecărui nivel corespunzându-i anumiți „constituenți”, cu caracteristici și comportament specifice și anumite tipuri de forțe de legătură, care între limite energetice proprii asigură o stabilitate respectivelor structuri. Desigur că descoperirea constituenților, respectiv a particulelor elementare care determină structura fiecărui nivel, precum și a forțelor de interacțiune dintre aceste particule a reprezentat și reprezintă și astăzi calea pe care se progresează continuu în investigarea profunzimii lumii materiale.

De fiecare dată, constituenții unui nivel s-au dovedit a avea și ei o structură complexă, formată din alți constituenți mai elementari, așa cum s-a menționat mai sus, care se mențin în respectiva structură prin intermediul unor forțe de interacțiune specifice. Astfel, la nivel cosmic, structurile sînt determinate de interacțiile gravitaționale, iar la nivel atomic, de cele electromagnetice. În § 12.3 și 12.5 s-a vorbit despre alte două tipuri de interacții și anume de interacțiile tari, care intervin în structura nucleului atomic și de interacțiile slabe, care condiționează dezintegrările β .

Astăzi se admite că fiecare tip de interacție se realizează prin intermediul unor cuante care mediază cîmpul de interacție. Aceste cîmpuri sînt generate de anumite sarcini, care, de regulă, aparțin particulelor aflate în interacție. Așa, de exemplu, cîmpul gravitațional este generat de *sarcini sau de mase gravifice*, iar cîmpul electromagnetic este generat de *sarcini electrice*. Pentru descrierea cîmpului interacțiilor tari s-a introdus noțiunea de *sarcină culoare* (color charge), iar pentru descrierea cîmpului interacțiilor slabe, noțiunea de *sarcină aromă* (flavour charge). Aceste noi sarcini sînt specifice particulelor întîlnite la actualul nivel de structură al materiei, și anume la nivelul quark-leptonic, quarcii fiind particule (neidentificate experimental) pe care le-au introdus, în anul 1963, fizicienii M. Gell-Mann și G. Zweig în încercarea lor de a realiza o primă sistematizare a particulelor elementare.

Cercetările din fizica particulelor elementare au condus la concluzia că noțiunea de sarcină este o noțiune primară. Funcție de valorile și de tipul acestor sarcini se obțin nu numai clase distincte de particule, ci și clase distincte de interacții. Experimental s-a dovedit că în toate procesele la care participă particulele purtătoare de sarcini, valoarea acestor sarcini se conservă. Înseamnă că sarcinile în cauză exprimă legi de conservare mai profunde ale naturii. Așa, de exemplu, legea conservării masei inerțiale (privită în sens relativist, ca măsură a energiei și impulsului) este generată de cerința invarianței legilor fizicii față de translația spațio-temporală. Simetrii cinematice mai profunde corespund, probabil, legilor de conservare ale sarcinilor electrice, culorii și aromei.

Din punctul de vedere al interacțiilor ce apar între două particule purtătoare de sarcină, merită să menționăm faptul că întotdeauna „tăria”

acestor interacții este direct proporțională cu produsul celor două sarcini ale particulelor aflate în interacție. Forțele de interacție sînt caracterizate printr-o anumită lege matematică, în care pe lîngă sarcinile particulelor mai intervine și distanța dintre ele. Sînt bine cunoscute relațiile care exprimă forțele de interacție gravitațională și electrostatică. În primul caz, de exemplu, forța de atracție dintre două particule, de mase m_1 și m_2 , aflate la distanța reciprocă r este dată de expresia

$$\mathbf{F}_{12} = -k \frac{m_1 \cdot m_2}{r_{12}^3} \mathbf{r}_{12} \quad (12.10.1)$$

în care constanta $k = 6,67 \cdot 10^{-11} \text{ N} \cdot \text{m}^2/\text{kg}^2$ reprezintă constanta gravifică.

În fizica particulelor elementare există alte două modalități de a exprima tăria forțelor de interacție, legate și de faptul că încă nu dispunem de expresii matematice simple, care să exprime forțele de interacție tare și slabă. Prima, folosește noțiunea de *constantă de cuplaj* (α), care intervine în hamiltonianul caracteristic respectivei interacții într-un calcul cuantic de perturbație, iar a doua folosește noțiunea de *secțiune eficace de împrăștiere* (definită în § 12.6), care descrie procesul de interacție din fenomenele de împrăștiere ale particulelor pe alte particule.

În cazul interacțiilor electromagnetice, constanta de cuplaj α_e este tocmai *constantă structurii fine*, definită prin expresia (10.2.25). S-a văzut că ea este o constantă adimensională și are valoarea *

$$\alpha_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = \frac{1}{137} \quad (12.10.2)$$

Pentru interacțiile gravitaționale, constanta de cuplaj se definește prin expresia

$$\alpha_g = k \frac{m_p^2}{\hbar c} \quad (12.10.3)$$

m_p fiind masa proprie a protonului. Se constată că această constantă are o valoare extrem de mică

$$\alpha_g = 6 \cdot 10^{-39} \quad (12.10.4)$$

din care motiv interacțiile gravitaționale sînt cu totul nesemnificative în comparație cu cele electromagnetice, slabe sau tari și ele vor juca un rol cu totul neînsemnat la nivelul particulelor elementare.

Interacția slabă este caracterizată printr-o constantă de cuplaj

$$\alpha_s = \frac{g_s^2}{4\pi\hbar c} \approx 10^{-14} \quad (12.10.5)$$

* Factorul $(4\pi\epsilon_0)^{-1}$ intervine datorită alegerii unităților de măsură în SI. În sistemul CGS acest factor se alege unitar.

iar interacția tare, printr-o constantă de cuplaj α_t supraunitară

$$\alpha_t = \frac{g_t^2}{4\pi\hbar c} \gtrsim 1. \quad (12.10.6)$$

În privința cuantelor care realizează cîmpul de interacție și deci care asigură un caracter de schimb tuturor tipurilor de interacție, trebuie reținut faptul că toate aceste cuante aparțin clasei bosonilor, avînd spinul întreg (sau zero). Ele mediază interacția respectivă, întocmai cum fotonul realizează interacția electromagnetică între sarcini electrice. Cuantele cîmpului gravitațional sînt denumite *gravitoni* și încă n-au fost identificate experimental. Cuantele purtătoare de interacții slabe se numesc *bosoni vectoriali intermediari*. Astăzi știm că există mai multe tipuri de astfel de bosoni și anume, bosonii intermediari W^\pm , purtători de sarcină electrică și de masă proprie ($m_W = 77 - 84 \text{ GeV}$) și bosoni intermediari Z^0 , neutri, cu masa $m_{Z^0} = 88 - 95 \text{ GeV}$.

În sfîrșit, cuantele cîmpului interacțiilor tari au primit numele de *gluoni*. Ei realizează forțele de interacție între quarci și, așa cum se va arăta în paragraful următor, teoriile actuale utilizează 8 tipuri distincte de gluoni, particule despre a căror existență s-au obținut informații experimentale începînd cu anul 1979 (primele rezultate anunțate în conferințele de la Geneva și Batavia din acel an). Nu există însă nici o informație experimentală în legătură cu masa proprie a gluonilor (unii o consideră nulă).

Din cele cîteva date prezentate mai sus rezultă că între cuantele diverselor cîmpuri de interacție există și deosebiri, nu numai asemănări. Unele dintre aceste deosebiri sînt chiar foarte însemnate. De exemplu, fotonul nu posedă masă proprie și nu modifică sarcina electrică a particulelor între care mediază interacția. În schimb, bosonii vectoriali intermediari W^\pm posedă atît masă de repaus cît și sarcină electrică, iar gluonii sînt purtători de sarcină culoare. Din acest motiv, gluonii pot modifica sarcina quarcelor între care mediază interacția și, în plus, ei pot interacționa (tare) chiar și între ei. De asemenea, bosonii vectoriali intermediari modifică sarcina aromă.

Dacă ne reamintim că aceste interacții se realizează în cadrul limitelor de valabilitate ale relațiilor de nedeterminare ale lui Heisenberg vom fi nevoiți să admitem, pentru cuantele de interacție, un timp de viață $\tau = \Delta t$, dat de relația

$$\Delta t = \frac{\hbar}{2\Delta E} \quad (12.10.7)$$

în care ΔE va fi o măsură a energiei respectivei cuante. Desigur că în limitele acestui interval de timp va interveni și o violare a legii relativiste de conservare a energiei, respectiv a impulsului particulei care realizează interacția, în sensul că

$$E_p^2 \neq p^2 c^2 + m_0^2 c^4 \quad (12.10.8)$$

Din acest motiv, toți bosonii care mediază interacții de diverse tipuri sînt de fapt particule virtuale. Inseși interacțiile se realizează prin procese vir-

tuale, în care se conservă sarcina electrică, straniețea și alte numere cuantice ale participanților la interacție, dar nu și energia și impulsul acestora, ceea ce face ca respectivele procese să se poată desfășura și sub energia de prag, dacă sînt endoenergetice.

Pentru prezentarea schematizată a unui proces virtual se folosește o ingenioasă metodă grafică, imaginată și folosită de R. Feynman în electrodinamică cuantică și cunoscută sub denumirea de *metoda diagramelor Feynman*. În aceste diagrame, axa timpului este îndreptată de la stînga la dreapta, particulele fiind reprezentate prin linii, începutul unui proces de interacție prin noduri în care converg aceste linii, iar desfășurarea virtuală a procesului printr-o linie ondulată, care de regulă leagă două noduri. Prin săgeți, orientate în sensul scurgerii timpului sînt marcate particulele care participă la procesul respectiv, iar prin săgeți, orientate în sens invers, antiparticulele.

În figura 12.10.1 sînt reprezentate sub formă de diagrame Feynman cele patru tipuri de interacții fundamentale. În diagrame, prin q se notează de obicei quarkul, prin \bar{q} antiquarkul, iar prin g gluonii, celelalte notații fiind cunoscute.

În § 12.3 s-a arătat că de masa unei particule virtuale care realizează interacția prin forțe de schimb este legată și raza de acțiune a respectivelor

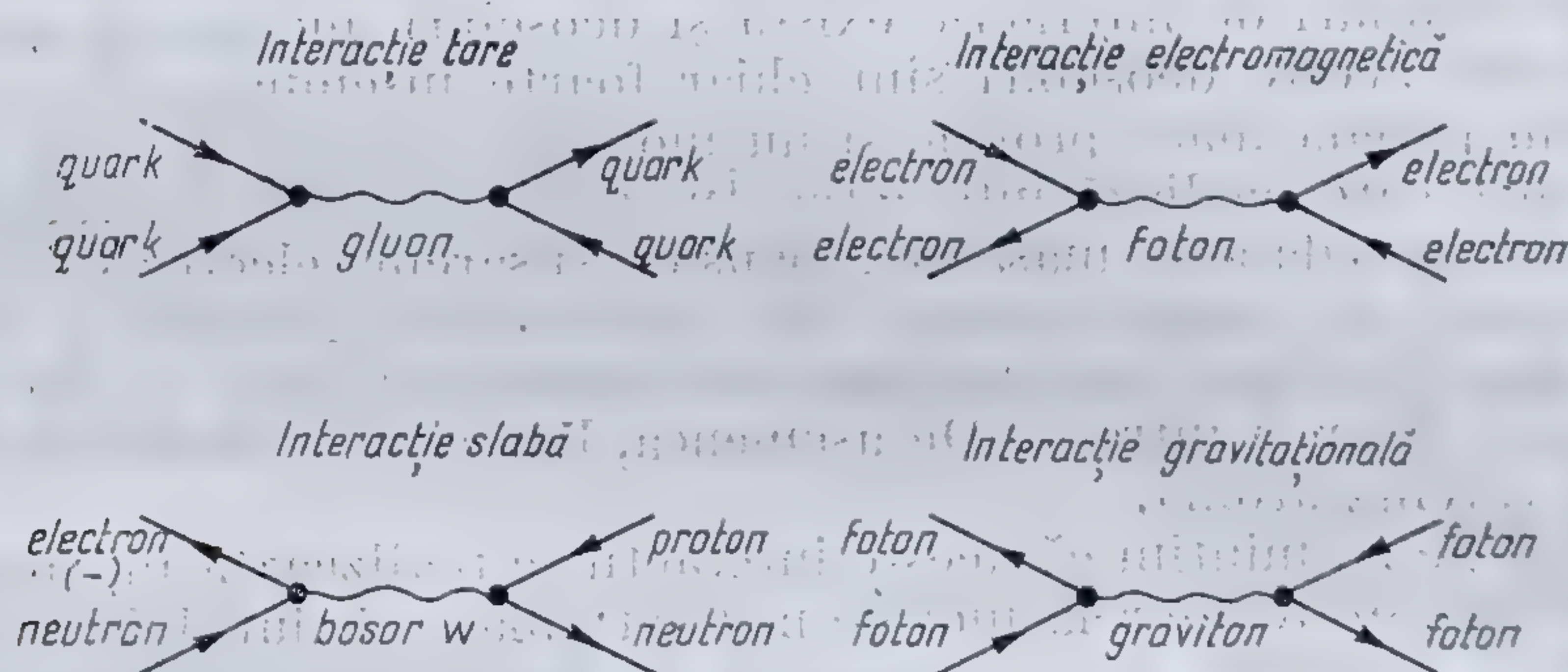


Fig. 12.10.1

forțe. Interacțiile electromagnetice și cele gravitaționale, fiind mediate de corpusculi cu masă proprie nulă, sînt interacții cu rază lungă de acțiune (potențialul cîmpului acestor forțe variază proporțional cu inversul distanței (vezi § 6.6)). Din acest motiv, efectul lor este sesizabil și la scara noastră, macroscopică, de existență. În schimb, bosonii vectoriali intermediari (W^\pm și Z^0), avînd o masă de repaus foarte mare, asigură o rază de acțiune de numai 10^{-19} m pentru interacțiile slabe, iar gluonii (despre a căror masă nu avem încă nici un indiciu) asigură o rază de acțiune egală cu 10^{-15} m, pentru interacțiile tari.

Principalele caracteristici ale acestor patru tipuri de interacții fundamentale sînt prezentate în tabelul următor :

Nr. crt.	Tipul interacției	Tăria interacției	Distanța de acțiune	Particulele asupra cărora acționează	Cuantele câmpului	Masa cuantelor	Spinul cuantelor	Natura forțelor între particule identice
1	Tare	1	10^{-15}m	quarci	gluonii	?	1	repulsivă
2	Electromagnetică	10^{-2}	∞	particule încărcate electric	fotonii	0	1	repulsivă
3	Slabă	10^{-15}	10^{-10}m	leptoni quarci	boșonii vectoriali intermediari	80—100 GeV	1	repulsivă
4	Gravitațională	10^{-39}	∞	toate particulele	gravitonii	0	2	atractivă

Întrucît între tipurile fundamentale de interacție și proprietățile diferitelor categorii de particule elementare există o legătură directă vom expune, în continuare succint, principalele idei teoretice și experimentale, care constituie fundamentul teoriilor actuale din fizica particulelor elementare. Vom începe cu prezentarea problematiei legate de interacțiile electromagnetice, în care caz s-a constituit deja o teorie aproape încheiată, cunoscută sub denumirea de *electrodinamică cuantică*. Vom continua apoi cu studiul interacțiilor tari și al celor slabe, lăsînd la o parte interacția gravitațională, de mai mică importanță pentru studiul particulelor elementare.

12.10.3. INTERACȚIA ELECTROMAGNETICĂ (NOȚIUNI DE ELECTRODINAMICĂ CUANTICĂ)

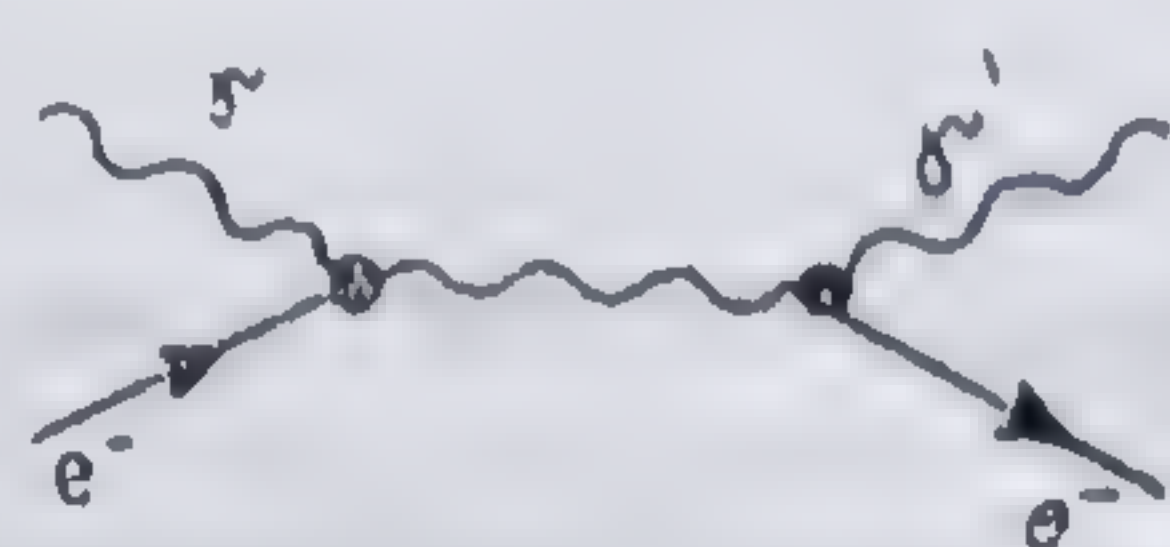
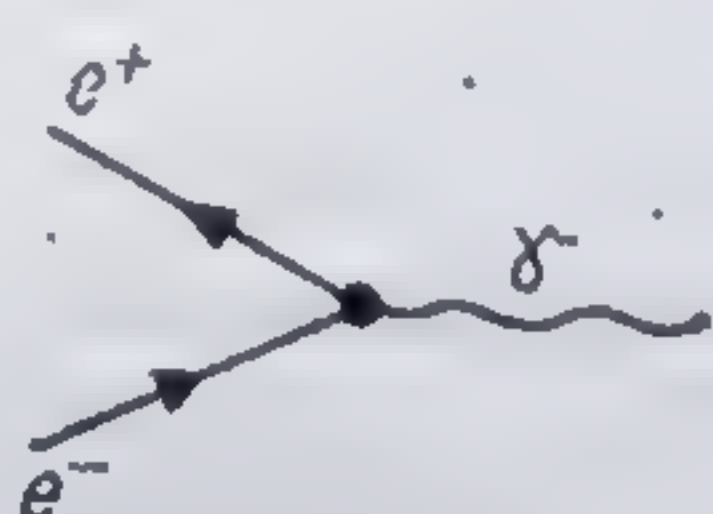
Acest tip de interacție a fost studiat în detaliu, îndeosebi pe procesele la care participă leptonii—electronii, pozitronii, miuonii μ^\mp și fotonii, particule care nu participă la interacții tari. S-a ajuns la concluzia că procesele de interacție dintre leptoni încărcăți cu sarcini electrice și fotoni, de tipul celor reprezentate în diagramele din figura 12.10.2, sînt procese fundamentale, întrucît toate celelalte pot fi reduse, sub aspectul studiului lor teoretic, la aceste procese. Primul reprezintă împrăștierea unui lepton încărcat, cu emisia sau absorbția unui foton, iar al doilea, un proces de anihilare (sau de creare) a unei perechi de lepton-antilepton, cu emisia sau absorbția unui foton. Într-adevăr, celelalte procese, condiționate de interacția electromagnetică, cum este de exemplu efectul Compton, schițat în diagrama din figura 12.10.3, pot fi reduse, așa cum ușor se poate constata, la primele două procese.

Teoria proceselor condiționate de interacția electromagnetică a fost creată în decursul celui de al cincilea deceniu al secolului nostru, prin lucrările lui J. Schwinger, R. Feynman, F. Dyson, S. Tomonaga și alții, fiind cunoscută sub denumirea de *electrodinamică cuantică*. Această teorie își are de fapt începutul în lucrările mai vechi ale lui P.A.M. Dirac, care pe de o parte a reușit să scrie ecuațiile cuantice de undă relativiste (vezi § 8.11), iar pe de altă parte, să formuleze o interesantă teorie a cuantificării câmpului electromagnetic (§ 8.9).

Se știe că ecuațiile lui Dirac (8.11.6) au introdus, între altele, noțiunea de antiparticulă, pozitronul fiind antiparticula electronului. Pozitronul



12.10.2



12.10.3

fiind interpretați ca „goluri” în banda de stări complet populată cu electroni, s-a ajuns la o interesantă concepție cu privire la *starea de vid*. Dacă după înlăturarea eterului, vidul era considerat ca un „spațiu liber”, lipsit de particule, teoria lui Dirac conduce la concluzia că, de fapt, vidul trebuie să fie complet populat cu electroni. În același timp, prezența oscilațiilor cuantice de nul (vezi § 8.8) face posibilă apariția spontană a unor fotoni și de aici rezultă concluzia că există un *câmp unic*, *electrono-pozitrono-fotonic*, care este tocmai câmpul interacțiilor electromagnetice. În cadrul acestui câmp, separarea fotonilor de sistemul electrono-pozitronic este de fapt artificială. Ea se poate face numai datorită faptului că constanta de cuplaj α_e este mică.

Prin urmare, electrodinamica cuantică descrie câmpul electrono-pozitrono-fotonic, câmp ce poate exista și în vid și în care pot interveni tranziții directe ale electronilor din starea cu energia negativă în starea cu energie pozitivă, tranziții însoțite de emisia sau absorbția unor cuante ale câmpului electromagnetic, respectiv a fotonilor. Numai că o astfel de imagine, deși foarte tentantă, era la început greu de acceptat din cauză că atât vidului electronic, cât și câmpului electromagnetic trebuia să li se asocieze valori infinite de mari pentru densitatea de sarcină electrică și pentru energia electronilor din starea cu $E < 0$, respectiv pentru energia câmpului electromagnetic.

Două au fost faptele experimentale care au reclamat cu insistență depășirea acestor dificultăți interpretative și anume :

a) *deplasarea Lamb* a nivelurilor energetice atomice ;

b) *diferența dintre valoarea experimentală a momentului magnetic electronic de spin și valoarea magnetonului Bohr-Procopiu*, diferență stabilită cu mare precizie, prin măsurători de rezonanță magnetică, de către Rabi.

Primul rezultat s-a evidențiat cu pregnanță în cazul celor două sub-nivele energetice ale atomului de hidrogen, $2^2 S_{1/2}$ și $2^2 P_{1/2}$, care, potrivit teoriei cuantice relativiste a atomului (vezi (10.2.67)), ar trebui să fie suprapuse, intervenind o degenerare după numărul cuantic intern j . Or, inves-

tigații experimentale de mare finețe au condus la concluzia certă că sub-nivelul $2^2 S_{1/2}$ este deplasat în sus, spre domeniul energiilor mai mici în valoarea absolută, în raport cu subnivelul $2^2 P_{1/2}$, cu o valoare $\Delta E \simeq 1,046 \cdot 10^{-4}$ eV, careia îi corespunde o deplasare de frecvență, a termenilor spectrali, în valoare de

$$\Delta\nu(2^2 S_{1/2} - 2^2 P_{1/2}) = 1057,862 \text{ MHz.} \quad (12.10.9)$$

Desigur o deplasare cu numai 10^{-4} eV a unui nivel energetic pare cu totul nesemnificativă în comparație cu energia nivelului fundamental al hidrogenului, $E_1 = 13,6$ eV, dar valoarea prezentată în (12.10.9) a fost obținută mereu, în experiențe repetate cu multă precauție și de aceea a început să suscite un mare interes în rîndul teoreticienilor.

O situație similară s-a întîlnit în cazul măsurătorilor exacte ale valorii momentului magnetic de spin al electronului. Conform teoriei lui Dirac (§ 8.9), factorul g_s trebuie să aibă valoarea 2, pentru electroni. Or, din măsurători foarte precise de rezonanță magnetică, s-a obținut în mod repetat o aceeași abatere a lui g_s de la valoarea 2, exprimabilă prin valoarea

$$a = \frac{1}{2} (g_s - 2) \cdot 10^3 = 1,15965241. \quad (12.10.10)$$

Cele două fapte experimentale au constituit nu numai un imbold în tentativa de a construi o nouă teorie cuantică relativistă a interacțiilor electromagnetice, ci ulterior și girul unor verificări experimentale de mare finețe ale veridicității acestei noi teorii, numită *electrodinamică cuantică*. Într-adevăr, prin calcul, s-au găsit, pentru $\Delta\nu$ și a , următoarele valori teoretice :

$$\begin{aligned} \Delta\nu(2^2 S_{1/2} - 2^2 P_{1/2}) &= 1057,864 \text{ MHz} \\ a &= \frac{1}{2} (g_s - 2) \cdot 10^3 = 1,159652379. \end{aligned} \quad (12.10.11)$$

Concordanța acestor valori cu cele experimentale, prezentate în (12.10.9) și (12.10.10), este într-adevăr uimitoare.

Metodele teoretice de studiu care fac obiectul electrodinamicii cuantice, dezvoltate îndeosebi de R. Feynman, își au originea în constatarea că prin calcularea secțiunilor eficace de împrăștiere a fotonilor pe electroni (efect Compton), cu tehnica obișnuită a teoriei cuantice a perturbațiilor (vezi § 8.10), se obțin rezultate teoretice apropiate ca valoare de cele experimentale numai atunci cînd se utilizează aproximația de ordinul întîi, contribuția ordinelor superioare fiind adesea infinit de mare. De aici concluzia că conceptele de bază ale teoriei trebuia schimbate. Feynman încearcă și reușește să rezolve problema de mai sus, în linii mari în același cadru, dar plecînd de la ecuația lui Dirac, scrisă în prezența unui cîmp electromagnetic descris printr-un potențial vector $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$. În acest caz, ecuația Dirac (8.11.5) ia forma

$$[c(\alpha_1 \hat{p}_1 + \alpha_2 \hat{p}_2 + \alpha_3 \hat{p}_3 + \alpha_4 \hat{p}_4) - e\hat{\mathbf{A}}] \psi = E\psi \quad (12.10.12)$$

Pentru găsirea funcției de undă ψ , care satisface această ecuație, se folosește metoda funcțiilor Green (vezi Anexa 4) prin care se obține nu numai o simplificare simțitoare a calculelor, ci se poate evita și prezența termenilor infiniți din rezultatele finale cu semnificație fizică*.

Soluția obținută este exprimabilă sub forma unor termeni ce pot fi calculați prin aproximații succesive. În același timp, pentru secțiunile eficace de împrăștiere ale diverselor procese determinate de interacția electromagnetică, tehnica perturbațiilor cuantice folosește un hamiltonian de perturbație, a cărei intensitate este determinată de constanta structurii fine, α_e . În felul acesta s-a putut calcula cu mare precizie amplitudinea probabilității de tranziție pentru procesele electromagnetice fundamentale, schițate în fig. 12.10.2 și pentru procese de ordine superioare (cum este efectul Compton), creîndu-se metoda diagramelor Feynman [75, 85], care conduce, de asemenea prin calcule relativ simple, la rezultate concordante cu cele experimentale. Se ajunge la concluzia că amplitudinea probabilităților de tranziție, în cazul proceselor elementare, este proporțională cu $\sqrt{\alpha_e}$. Atunci, pentru un proces complex, amplitudinea va fi dată de produsul amplitudinilor proceselor elementare, fiind proporțională cu $(\sqrt{\alpha_e})^n$, pentru un proces de ordinul n (cu n noduri). De remarcat că descompunerea unui proces în treptele sale elementare face posibil calculul, întrucît termenii de ordin superior sînt mici $\left(\alpha_e = \frac{1}{137} < 1\right)$. Așa s-a putut calcula, de exemplu, secțiunea eficace a efectului Compton, rezultatul fiind exprimat prin relația (8.2.22).

Metodele de studiu ale electrodinamicii cuantice au fost extinse și la alte tipuri de interacții fundamentale. În primul rînd s-a generalizat noțiunea de antiparticulă, astăzi existînd convingerea că fiecărei particule îi corespunde o antiparticulă (vezi tabelul din Anexa 6). Numai antiparticulele pionului neutru π^0 și ale mezonului η^0 sînt identice cu respectivele particule. Dar imaginea simplă despre antiparticule, ca goluri în benzile energetice complet populate cu particule, deși principal poate fi exstinsă, nu a condus la agonisirea de cunoștințe principal noi. Așa cum se poate vedea din Anexa 6, antiparticulele sînt caracterizate prin numere cuantice de semne contrare celor corespunzătoare particulelor (în afară de spin).

12.10.4. INTERACȚIA TARE (NOȚIUNI DE CROMODINAMICĂ CUANTICĂ)

Interacțiile tari au fost și sînt studiate experimental prin procese la care participă *hadronii*. Astăzi se admite că aceste interacții se realizează între quarci, prin intermediul gluonilor, așa cum s-a menționat în § 12.10.2,

* Printr-un procedeu de renormare sau de reetalonare a masei de cîmp a electronului, termenii infiniți care intervineau în descrierea cîmpului electrono-pozitrônio-fotonie sînt transferați unui alt nivel de structură, mai profund [85, 87], rămînînd în felul acesta în afara rezultatelor cu semnificație fizică certă.

forțele nucleare fiind derivate slabe ale acestor forțe, întocmai cum forțele moleculare (forțele Van der Waals) sint derivate slabe ale forțelor electromagnetice (în ultimul caz, forțele se nasc între atomi neutri, fiind determinate de fluctuațiile sarcinilor electrice; forțele nucleare apar între barioni neutri din punct de vedere al sarcinii culoare, ca urmare a fluctuațiilor acestor sarcini).

Noțiunea de quark, a fost introdusă în anul 1963, așa cum s-a menționat mai sus, dar încă în anul 1961 fizicienii M. Gell-Mann și Y. Ne'eman încearcă să folosească teoria grupurilor pentru a explica simetria de aranjare a decupletului barionic, prezentat în diagrama din fig. 12.10.4, în care numerele cuantice ale respectivelor particule ascultă de o simetrie tridimensională, denumită *simetrie unitară*. Ea este reprezentată de grupul de simetrie SU(3).

Merită relevat aici faptul că în prima aranjare, făcută de Gell-Mann, barionul Ω^- nu era încă cunoscut, dar pe baza elementelor de simetrie ale grupului, acestei particule i s-au prezis valori pentru respectivele numere cuantice. Faptul că în,

anul 1964, cercetătorii de la Brookhaven au descoperit barionul Ω^- și au confirmat în totalitate valorile prezise de simetria SU(3) a fost asemuit cu descoperirea prin calcul a planetei Pluton de către Leverier.

Quarcii au fost propuși tocmai pentru a explica simetria SU(3). La început au fost introduse trei tipuri de quarci (și trei antiquaci), dar ulterior s-a simțit nevoia introducerii a încă unui quark pentru a se putea explica comportamentul particulelor stranii. Este vorba despre particule care se generează prin interacții tari, dar se dezintegrează prin interacții slabe, al căror comportament poate fi descris printr-un număr cuantic S — numit straniețate, introdus de M. Gell-Mann și K. Nishijima. După anul 1975 s-au mai introdus încă două tipuri de quarci, așa încât teoria actuală a interacțiilor tari utilizează 6 quarci și 6 antiquarci.

Admițându-se că quarcii posedă spin semiîntreg, fiind deci fermioni, ei vor trebui să se supună principiului de excluziune. Or, toate considerentele de ordin teoretic conduceau la concluzia că încă primii trei quarci (numiți adesea quarci de valență sau quarci „bătrâni”) puteau ocupa concomitent aceeași stare cuantică. Înseamnă că aceștia nu sint particule identice și, de aceea, trebuie introdus un nou grad de libertate care să facă distincție între ei. Așa a apărut noțiunea de sarcină culoare.

Se admite că există trei tipuri distincte de sarcină culoare și anume sarcina R (roșu, de la englezescul red), sarcina Y (galbenă-yellow) și sarcina

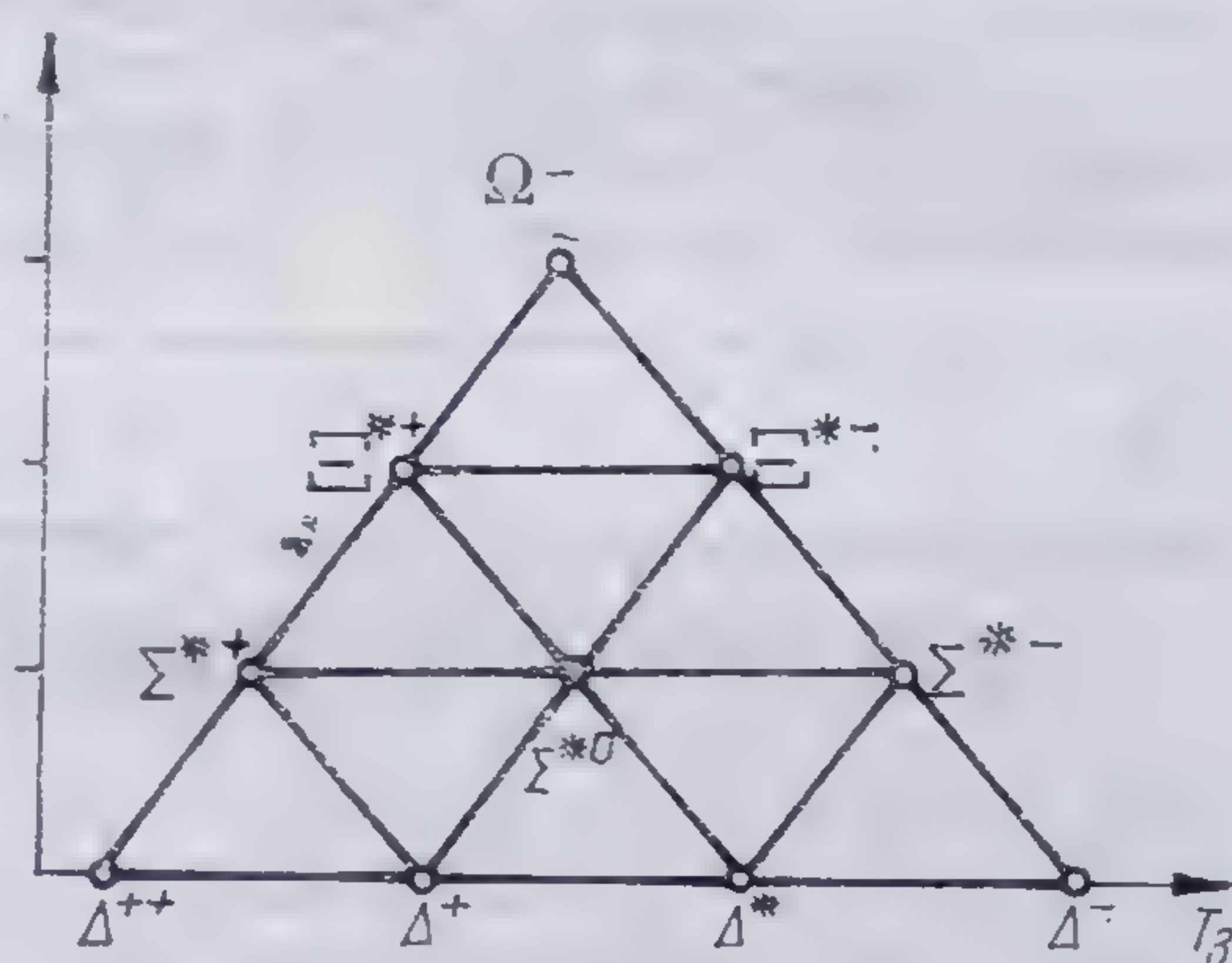


Fig. 12.10.4

B (albastru — blue), denumirile neavind, desigur, nici o legătură directă cu ceea ce ele desemnează în mod obișnuit. Îndeosebi studiul interacțiilor slabe a solicitat introducerea și a noțiunii de *sarcină aromă*, distinctă pentru fiecare dintre cei șase quarci. Există deci 6 tipuri de astfel de sarcini, respectiv 6 tipuri distincte de quarci, notați prin simbolurile u (up), d (down), s (strange), c (charm) b (bottom) și t (top).

Fiecare tip de quark posedă numere cuantice proprii a căror valoare este de semn opus pentru antiquarci. Spre deosebire însă de numerele cuantice întâlnite la particulele elementare, pentru quarci s-au mai definit încă trei numere cuantice și anume numărul c (charm-farmec), numărul b (beauty — frumusețe) și numărul t (truth — sinceritate), denumirile fiind și de această dată pur gratuite. În tabelul de mai jos sunt prezentate principalele caracteristici cuantice ale quarcilor.

Nr. crt.	Tip de quark	Sarcina B	Spinul I	Sarcina Q	Izo-spinul T	Stranieta-tea S	Farmecul c	Sinceritatea t	Frumuse-țea b	Masa (MeV)	Com-ponen-ta T_3
1	u	$1/3$	$1/2$	$+2/3$	$1/2$	0	0	0	0	300	$1/2$
2	d	$1/3$	$1/2$	$-1/3$	$1/2$	0	0	0	0	300	$-1/2$
3	s	$1/3$	$1/2$	$-1/3$	0	-1	0	0	0	500	0
4	c	$1/3$	$1/2$	$+2/3$	0	0	1	0	0	1500	0
5	b	$1/3$	$1/2$	$-1/3$	0	0	0	0	1	4700	0
6	t	$1/3$	$1/2$	$+2/3$	0	0	0	1			0

Există deci în total 36 de quarci și antiquarci, între ei interve-nind interacții tari datorită faptului că sunt purtători ai unor sarcini cu-loare. Teoria interacțiilor tari, bazată pe această idee, a fost creată în perioada anilor 70 de către M. Gell-Mann, H. Fritche, S. Weinberg și alții, fiind cunoscută sub denumirea de *Cromodinamică cuantică*. Ea a fost dez-voltată prin analogie cu electrodinamica cuantică, dar, așa cum se va ve-dea mai jos, intervin și diferențe serioase, care complică extrem de mult lucrurile.

În cromodinamica cuantică se admite că sarcina culoare este gene-ratoarea câmpului interacțiilor tari, iar cuantele acestui câmp sunt *gluonii*. Gluonii sunt bosoni cu spin întreg (nul) și posedă toate numerele cuantice nule ($B = Q = I = S = T = c = 0$), afară de culoare. De remarcă că chiar dacă am admite că gluonii ar fi corpusculi fără masă proprie, intervin distincții nete între câmpul interacțiilor electromagnetice și cel al interac-țiilor tari, deoarece gluonii sunt purtători de sarcină generatoare de câmp deci ei pot interacționa și unul cu altul. În același timp, spre deosebire de fotoni, care nu modifică sarcina electrică a particulelor aflate în interac-țiune, gluonii pot face acest lucru. De fapt, datorită constantei de cuplaj supraunitare a interacțiilor tari nu mai poate fi făcută o separare, nici măcar artificială a cuantelor de câmp, de particulele aflate în interacțiune.

Prin urmare, gluonii pot modifica sarcina culoare a quarcilor între care stabilesc interacția tare, nu însă și sarcina lor aromă. Din această pricină, gluonii trebuie să fie priviți ca purtători de combinații culoare-anticuloare. Vor exista tot trei tipuri de sarcină anticuloare, pe care, prin analogie cu notarea antiparticulelor, le vom nota prin \bar{R} , \bar{Y} , \bar{B} . De observat că cu cele trei tipuri de sarcini culoare și trei de sarcină anticuloare se pot realiza numai opt moduri distincte de combinare (culoare-anticuloare), ceea ce înseamnă că există opt tipuri distincte de gluoni de forma: $g_{R\bar{Y}}$; $g_{Y\bar{B}}$; $g_{B\bar{B}}$; $g_{Y\bar{R}}$ ș.a.m.d. Ne putem imagina interacțiile quarcilor prin intermediul acestor gluoni, sub forma unor scheme, ca

$$\left. \begin{aligned} q_R &\rightarrow q_Y + g_{R\bar{Y}}; & q_B &\rightarrow q_Y + g_{B\bar{Y}} \\ q_Y &\rightarrow q_B + g_{Y\bar{B}}; & q_R &\rightarrow q_B + g_{R\bar{B}} \\ q_B &\rightarrow q_R + g_{B\bar{R}}; & q_R &\rightarrow q_R \\ q_Y &\rightarrow q_Y & q_Y &\rightarrow q_Y \\ q_Y &\rightarrow q_R + g_{Y\bar{R}}; & q_B &\rightarrow q_B \end{aligned} \right\} \begin{aligned} &+ g_0 \\ &+ g'_0 \end{aligned} \quad (12.10.13)$$

în care s-au folosit notațiile: $g_0 = R\bar{R} - B\bar{B}$ și $g'_0 = R\bar{R} + B\bar{B} - Y\bar{Y}$. Astfel de scheme pot fi reprezentate și diagramatic, câteva exemple fiind date în fig. 12.10.5, în care se evidențiază și interacțiile dintre gluonii înșiși.

Faptul că interacțiile tari sînt descrise de un octet de cîmp vectorial gluonic este extrem de important și el explică structura de octet a multipleturilor din spectroscopia hadronică.

În cromodinamica cuantică studiul structurii hadronilor pleacă de la ipoteza că toți acești hadroni sînt particule cu culori ascunse (albe), în constituirea lor intrînd combinații de doi sau trei quarci și antiquarci, din primele trei tipuri de quarci prezentați în tabel, din care cauză aceștia au primit numele de *quarci de valență*. Pionii sînt, așa cum se va arăta în § 12.10.6, combinații de doi quarci, iar barionii — combinații de trei quarci. De regulă, însă, interacția dintre mai mulți quarci nu este aditivă; dealtfel nici cîmpul creat de mai mulți gluoni nu este aditiv. Se poate admite că fiecare hadron mai conține, în afara quarcilor de valență, și o „mare” evasicontinuă, în care se generează și se anihilează perechi quark-antiquark și firește, gluoni virtuali. Toți aceștia influențează masa hadronului, din care cauză ea nu poate avea o valoare exactă.

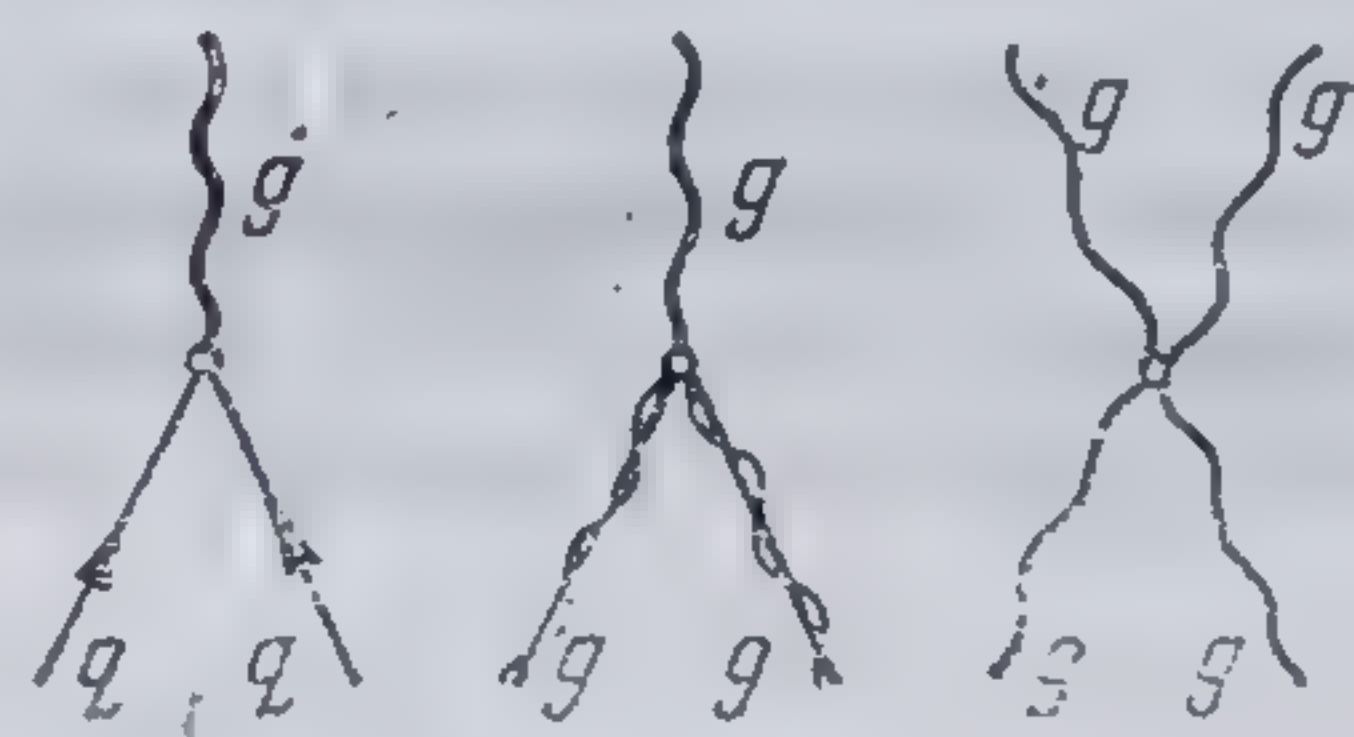


Fig. 12.10.5

Teoria, pe care nu o schițăm aici [110], conduce la concluzia că constanta de cuplaj, care descrie interacția tare dintre doi quarci, descrește logaritmic odată cu descreșterea distanței dintre aceștia, în așa fel încît, pentru $R \leq R_0 = 0,2 \cdot 10^{-15}$ m, interacția este practic neglijabilă. Din con-

tră, odată cu creșterea distanței dintre quarci, constanta de cuplaj crește, ceea ce determină o creștere a forțelor de interacție dintre quarc-odată cu creșterea distanței, situație exact inversă decît cea întîlnită la interacția electromagnetică. Consecința acestui fapt este aceea că un quark nu poate exista în stare liberă. Sarcina culoare, ca și sarcina electrică are o energie proprie (energie de cîmp) și deci „decolorarea” presupune un consum de energie, care este infinit de mare, pentru distanțe $R > R'_0 = 0,35 \cdot 10^{-15}$ m.

Este de-a dreptul surprinzător că și această concluzie este atestată de experiență. Pentru a ne da seama în ce mod, vom folosi relațiile de nedeterminare ale lui Heisenberg

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (12.10.14)$$

în care pentru Δx vom lua valoarea $\Delta x = R_0 \simeq 10^{-16}$ m. Atunci, pentru Δp se găsește valoarea

$$\Delta p > \frac{1 \text{ GeV}}{c} \quad (12.10.15)$$

c fiind viteza luminii în vid. Aceste rezultate prevăd, pentru hadroni cu energia mai mare de 1 GeV, posibilitatea de a se apropia pînă la distanțe de ordinul de acțiune al forțelor nucleare, cînd acțiunea puternică a lor ar trebui să se evedențieze direct. Or, se știe că în cazul împrăstierii hadron-hadron, la energii $E \geq 3 \div 5$ GeV, intervine o secțiune eficace de împrăstiere

$$\sigma = \pi(2R_H)^2 \quad (12.10.16)$$

de valori ridicate, hadronul țintă transformîndu-se practic într-o adevărată „sferă neagră” — perfect absorbantă pentru hadronul proiectil. Desigur, din (12.1.16), s-a obținut raza R_H a sferei hadronice ($R_H \simeq 0,35 \cdot 10^{-15}$ m), care poate fi considerată drept rază de acțiune a interacțiilor tari.

La energii mai mici, s-a constatat că secțiunea eficace de împrăstiere hadron—hadron prezintă o serie de *rezonanțe*, de tipul celor prezentate în figura 12.10.6, care desigur reprezintă niște stări metastabile. Din lărgimea acestor curbe de rezonanță se poate evalua energia și respectiv masa

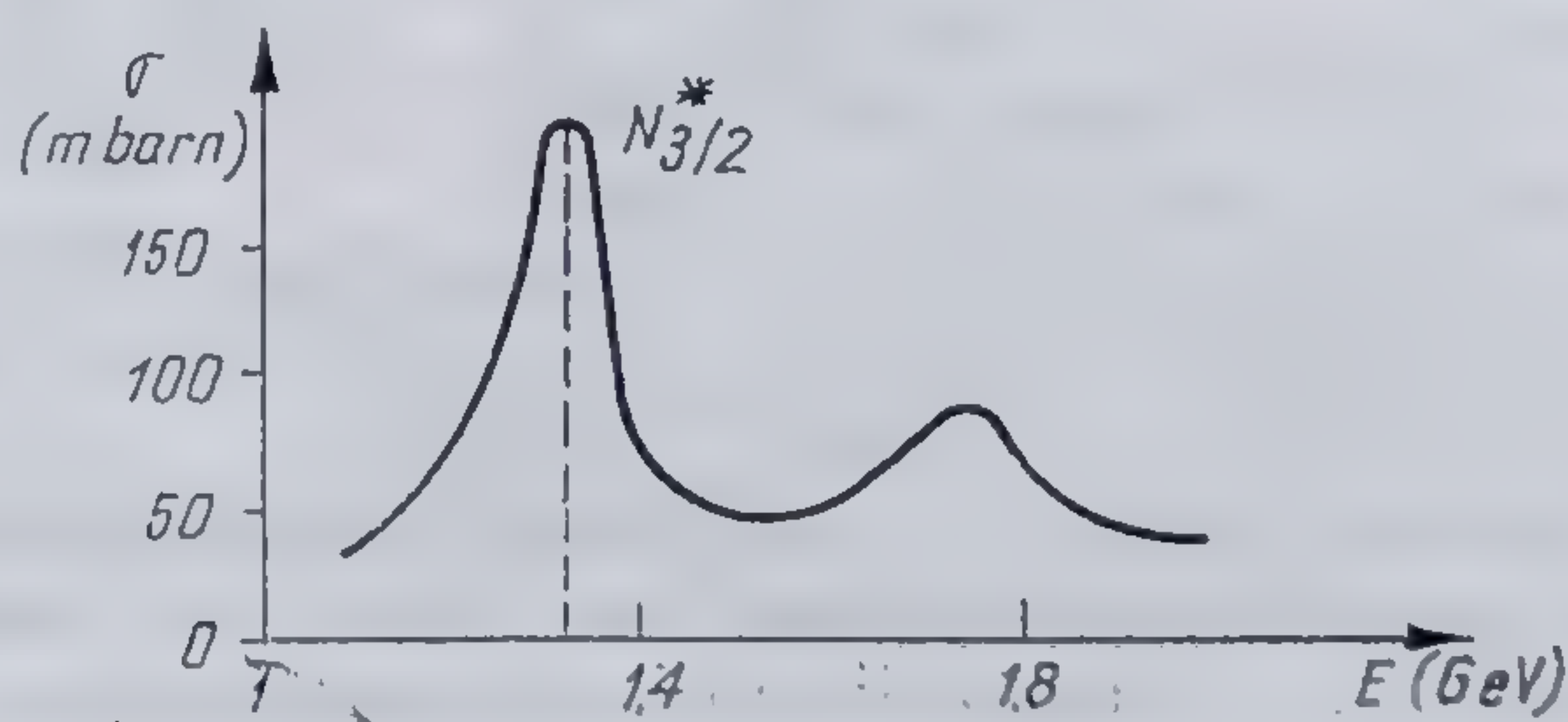


Fig. 12.10.6

ce le caracterizează, iar pe baza relației de nedeterminare energie — timp s-a stabilit timpul lor de viață τ . S-a constatat că toate aceste rezonanțe, care pot fi produse atât în împrăștierea pionilor (rezonanțe pionice), cit și a barionilor (rezonanțe barionice) posedă un timp de viață de numai $10^{-22} \div 10^{-23}$ s. În anul 1977 a fost descoperită o rezonanță cu masa de 9,5 GeV, astăzi cunoscându-se nu numai o serie de caracteristici cuantice ale acestor rezonanțe, ci și moduri de dezintegrare ale acestora, așa cum se poate vedea din tabelul următor în care sînt prezentate cîteva dintre rezonanțele mezonice și barionice.

Simbol	Masa MeV	Mod de dezintegrare	Simbol	Masa MeV	Mod de dezintegrare	Simbol	Masa MeV	Mod de dezintegrare
<i>Rezonanțe mezonice</i>								
η	~ 549	$\eta \rightarrow \gamma + \gamma$ $\pi^+ + \pi^+ + \lambda^0$ $\eta \rightarrow \pi^0 + \pi^0 + \pi^0$	H^0	~ 990	$H^0 \rightarrow 3\pi$	f^0	~ 1260	$f^0 \rightarrow \pi + \pi$ $K + \bar{K}$
ρ	~ 765	$\rho \rightarrow \pi + \pi$ $\eta + \pi^+$ (f. rar) $\rho \rightarrow e^+ + e^-$ $\rho \rightarrow \mu^+ + \mu^-$	ϕ	~ 1019	$\phi \rightarrow k^+ + k^-$ $\pi^+ + \pi^- + \pi^0$ $e^+ + e^-$; $\mu^+ + \mu^-$ $\eta + \gamma$ $\omega + \gamma$; $\rho + \gamma$	<i>Rezonanțe barionice</i>		
ω	~ 784	$\omega \rightarrow \pi^+ + \pi^- + \pi^0$ $\omega \rightarrow e^+ + e^-$ $\omega \rightarrow \eta + \text{alte particule}$ $\omega + \mu^+ + \mu^-$	A_1	~ 1070	$A_1 \rightarrow 3\pi$ $A_1 \rightarrow K + \bar{K}$	Δ	~ 1238	$\Delta \rightarrow N + \pi$ $\Delta \rightarrow N + \gamma$
							~ 1430	$N^* \rightarrow N + \pi$
						N^*	~ 1518	$N + \pi + \pi$
							~ 1550	$N + \eta$ $N + \pi$
							2190	$N + \pi + \pi$
η'		$\eta' \rightarrow \eta + \pi + \pi$ $\eta' \rightarrow \gamma + \gamma$ $\rho + \gamma$			$B \rightarrow \omega + \pi$ $\pi + \pi$; 4π	Δ	~ 1920	$N + \pi$ $\Sigma + K$
(χ^0)	~ 958	$\eta' \rightarrow \pi^0 + e^+ + e^-$ $\eta' \rightarrow \pi^0 + \omega$	B	~ 1235	$\eta + \pi$ $B \rightarrow \phi + \pi$ $\eta + \pi$		~ 2950	?

12.10.5. INTERACȚIA SLABĂ

S-a arătat, în § 12.5, că interacția slabă a fost pusă în evidență de studiul dezintegrărilor β . Astăzi se știe că acest tip de interacție determină toate tipurile de dezintegrare ale particulelor, în care nu intervin interacții tari sau electromagnetice, cum este cazul dezintegrărilor α . Așa, de exemplu, dezintegrarea β^\mp este descrisă printr-un proces de forma (12.5.27), respectiv prin schemele

$${}^1_0n \rightarrow {}^1_1p + e^- + \bar{\nu}_e; \quad {}^1_1p \rightarrow {}^1_0n + e^+ + \nu_e. \quad (12.10.17)$$

Sub forma diagramelor Feynman, aceste procese sînt reprezentate în figura 12.10.7.

Ulterior s-au descoperit procesele de dezintegrare ale particulelor μ^\pm și τ^\pm , care pot fi exprimate prin scheme de dezintegrare, de forma

$$\begin{aligned} \mu^- &\rightarrow e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu; & \tau^+ &\rightarrow \mu^+ + \nu_\mu + \bar{\nu}_\tau; & e^+ &\rightarrow \nu_e + \bar{\nu}_\tau \\ \mu^+ &\rightarrow e^+ + \nu_e + \bar{\nu}_\mu; & \tau^- &\rightarrow \mu^- + \bar{\nu}_\mu + \nu_\tau; & e^- &\rightarrow \bar{\nu}_e + \nu_\tau. \end{aligned} \quad (12.10.18)$$

Aceste procese au condus la descoperirea neutrinoilor miuonici ν_μ și taonici ν_τ și s-au dovedit extrem de interesante pentru studiul interacțiilor

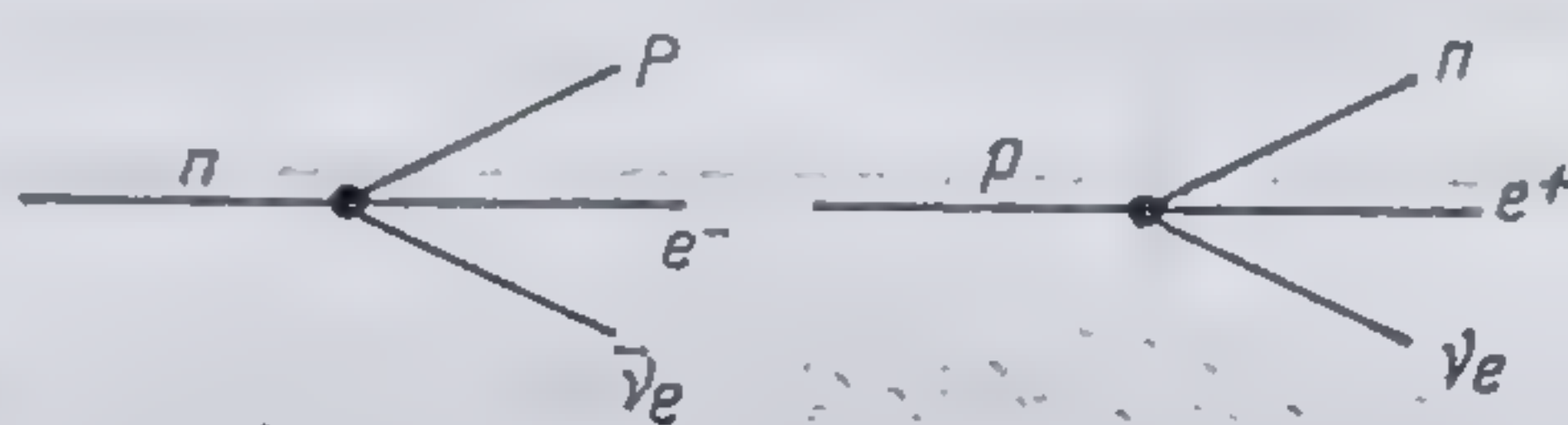


Fig. 12.10.7

slabe, deoarece la ele participă numai leptoni. Leptonii grei τ (taonii) au fost puși în evidență abia în anul 1975, de către colectivul de cercetători din Stanford.

Faptul că acești leptoni se dezintegrează prin interacții slabe este dovedit și de timpul de viață extrem de lung al acestor particule ($\sim 10^{-8}$ s), în comparație cu timpul nuclear (10^{-23} s). De aceea, prin studii experimentale pe aceste procese s-a urmărit stabilirea legilor de conservare care le guvernează, obținându-se printre altele, legea conservării numărului leptonic, a sarcinii, spinului, dar nu și a parității (vezi § 12.5). În consecință, era normal ca prima teorie a interacțiilor slabe să fie construită pe baza existenței a patru leptoni ($\mu^-, e^-, \nu_\mu, \nu_e$) și respectiv a celor patru antileptoni ($\mu^+, e^+, \bar{\nu}_\mu, \bar{\nu}_e$), neutrinii fiind particule care pot participa numai la interacția slabă.

Dar, după descoperirea particulelor stranii, s-a constatat că la interacția slabă pot participa nu numai leptonii, ci și hadronii stranii, întrucît aceștia sînt generați prin interacții tari și se dezintegrează prin interacții slabe. Un astfel de exemplu îl oferă mezonii K , existînd procese de dezintegrare de forma

$$K^+ \rightarrow \mu^+ + \nu_\mu. \quad (12.10.19)$$

Ba mai mult, în cazul hiperonului Λ^0 a fost evidențiat un proces de dezintegrare de tipul:

$$\Lambda^0 \rightarrow p^+ + \pi^- \quad (12.10.20)$$

care n-a putut fi pus pe seama interacțiilor tari sau electromagnetice, întrucît masa hiperonului Λ^0 este relativ mică. Din aceste considerente, procesul (12.10.20) trebuie să fie condiționat de interacții slabe. Dar se vede că la acest proces nu participă leptoni, ci numai hadroni.

Faptele experimentale menționate au condus la elaborarea actualei teorii asupra interacțiilor slabe. Este de remarcă că, încă în anul 1938,

O. Klein introduce o imagine nouă în conceperea proceselor de interacție slabă, de tipul (12.10.17). Anume, el separă aceste procese în două etape distincte, de forma :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}n &\rightarrow \frac{1}{2}p + W^-; & W^- &\rightarrow e^- + \bar{\nu}_e \\ \frac{1}{2}p &\rightarrow \frac{1}{2}n + W^+; & W^+ &\rightarrow e^+ + \nu_e \end{aligned} \quad (12.10.21)$$

în care, participantului intermediar W i s-a dat denumirea de *boson intermediar* W . Folosind pentru constanta de cuplaj o valoare apropiată de a celei corespunzătoare interacției electromagnetice, dar impunând condiția ca interacția slabă să aibă o rază scurtă de acțiune, s-au obținut mase foarte mari (> 200 GeV) pentru acești bosoni intermediari.

Ideile lui Klein au fost dezvoltate în lucrările lui J. Schwinger, din anul 1958 și apoi în cele ale lui S. Glashow, S. Weinberg, W. Lee, A. Salam și alții, care reușesc să explice nu numai multitudinea de procese determinate de interacția slabă, ci și să creeze o teorie unitară a interacțiilor slabe și electromagnetice. Se constată că între această nouă teorie și electrodinamica cuantică, respectiv cromodinamica cuantică, există o serie de analogii.

S-a menționat deja că noua teorie a interacțiilor slabe se bazează pe ipoteza existenței a trei tipuri de *bosoni vectoriali intermediari*, doi încărcăți W^\pm și unul neutru Z^0 . Dispunem astăzi doar de indicii indirecte cu privire la existența proceselor determinate de bosonii Z^0 și, de aceea, una dintre sarcinile majore ale cercetărilor întreprinse la noua generație de acceleratoare, de energii foarte mari, este punerea în evidență a existenței în stare liberă a acestor bosoni. Se acceptă faptul că aceste particule sînt de dimensiuni foarte mici (sub 10^{-19} m), că posedă mase proprii de valori ridicate și că realizează interacțiile slabe, fiind cuantele cîmpului acestui tip de interacție fundamentală.

Ținînd seama de faptul că atât neutronul cît și protonul sînt formați din structuri „albe” de quarci și anume, de tipul (uud), în cazul protonului și de tipul (ddu), în cel al neutronului (semnificația notațiilor fiind cea dată în tabelul de la p. 388, rezultă ușor că transformările de forma (12.10.21), mediate de bosonii intermediari W^\pm și Z^0 , pun în evidență proprietatea acestora de a schimba sarcina aromă a quarcelor din structura hadronilor. Într-adevăr, relațiile (12.10.21) trebuie scrise de fapt sub forma

$$\begin{aligned} d &\rightarrow u + W^-; & W^- &\rightarrow e^- + \bar{\nu}_e \\ u &\rightarrow d + W^+; & W^+ &\rightarrow e^+ + \nu_e \end{aligned} \quad (12.10.22)$$

În acest sens, se apreciază că sarcinile cîmpului interacțiilor slabe sînt sarcinile aromă (flavour charges).

Pe baza concluziei de mai sus s-a descoperit o interesantă simetrie unitară de tip SU(2), între leptoni și quarci, exprimată sub forma următoarelor perechi (dubleți) :

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nu_e \\ e^- \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} c \\ b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nu_\mu \\ \mu^- \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} t \\ b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nu_\tau \\ \tau^- \end{pmatrix}; \dots \quad (12.10.23)$$

Interacția din cadrul fiecărui dublet se va realiza, desigur, prin emisii sau absorbții a trei tipuri de bosoni vectoriali intermediari, prin procese de forma

$$A \rightleftharpoons B + W^+; \quad B \rightleftharpoons A + W^-; \quad A \rightleftharpoons A + Z^0 \quad (12.10.24)$$

a căror reprezentare, în diagramele Feynman, sînt schițate în fig. 12.10.8. Acestea sînt procesele elementare ale teoriei interacțiilor slabe. Studiul lor se face pe baza constantei de cuplaj α_s , a interacțiilor slabe. De obicei se folosesc două constante de cuplaj diferite în cazul leptonilor, după cum

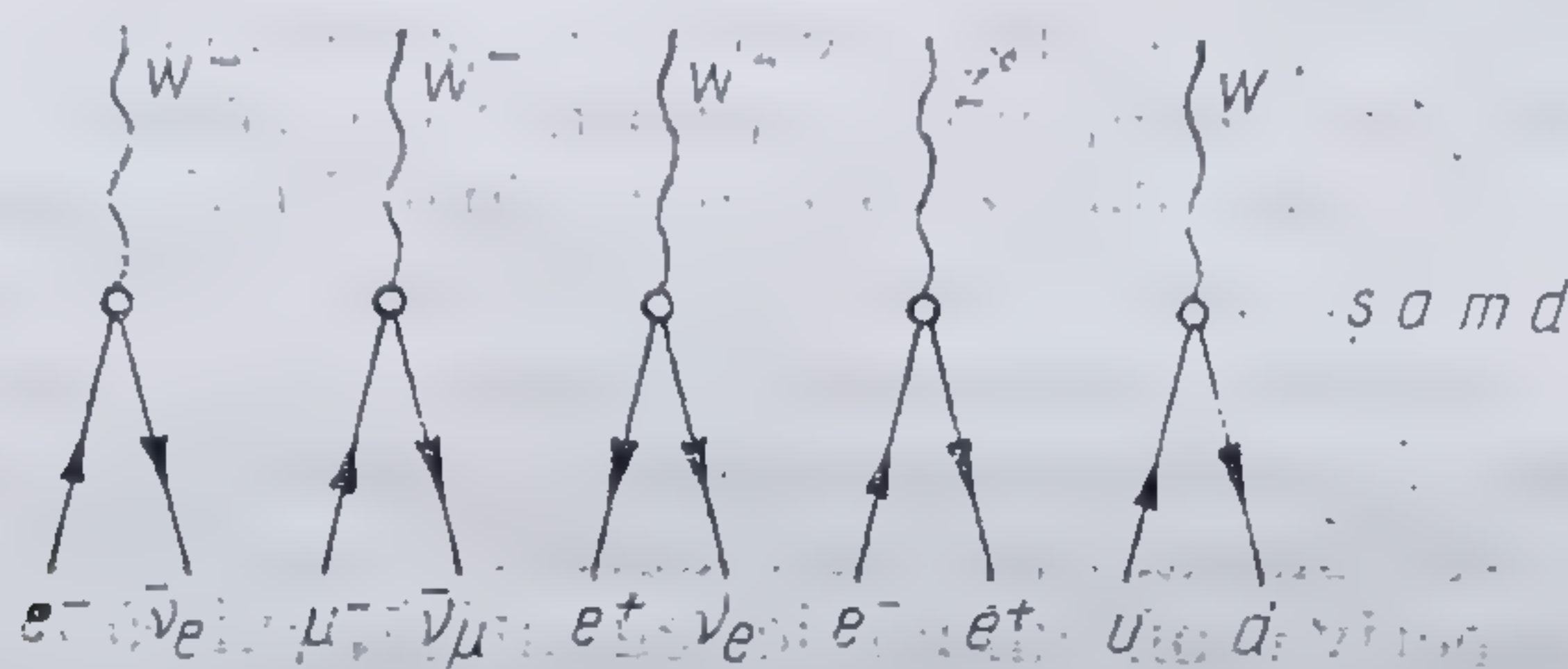


Fig. 12.10.8

interacția este mediată de bosoni încărcăți sau de bosoni neutri, dar de valori apropiate, valori date în (12.10.5).

De remarcat faptul că deoarece bosonii intermediari pot schimba sarcina aromă a quarcilor, înseamnă că sursele câmpului interacțiilor slabe nu mai sînt surse scalare (ca în cazul câmpului electromagnetic) și, de aceea, bosonii intermediari se mai numesc și bosoni vectoriali. Descoperirea curenților neutri de bosoni intermediari vectoriali, corespunzători particulelor caracterizate prin numărul cuantic c (farmec), a reprezentat principalul argument al introducerii quarcilor de tip c , apoi de tip b și t . În același timp, ei au constituit punctul de plecare în elaborarea *teoriei unitare a calibrării*, pentru care grupului format din S. Glashow, S. Weinberg și A. Salam i-a fost decernat premiul Nobel pentru fizică în anul 1979.

În teoria calibrării se consideră un câmp de bosoni Z^0 format din două componente, constanta de amestec fiind dată de unghiul Weinberg θ_W . Anume, pentru cuplaje prin interacții slabe, de forma $A \rightleftharpoons A + W^0$ și $B \rightleftharpoons B + Y^0$ se introduc două tipuri de bosoni Z^0 , date prin expresiile :

$$\begin{aligned} Z_1^0 &= W^0 \cos \theta_W + Y^0 \sin \theta_W \\ Z_2^0 &= -W^0 \sin \theta_W + Y^0 \cos \theta_W. \end{aligned} \quad (12.10.25)$$

Teoria calibrării descrie starea dubletelor, de tipul (12.10.23), prin superpoziții de funcții de undă, de forma

$$\psi'_{\nu_e} = \alpha \psi_{\nu_e} + \beta \psi_{e^-}; \quad \psi'_{\nu_\mu} = \alpha \psi_{\nu_\mu} + \beta \psi_{\mu^-}; \quad \dots \quad (12.10.26)$$

în care parametrii α și β sînt funcții variabile de poziție și de timp

$$\alpha = \alpha(\mathbf{r}, t); \quad \beta = \beta(\mathbf{r}, t). \quad (12.10.2)$$

Desigur că o asemenea alegere ne reamintește de simetria izotopică (§ 12.3), din cadrul forțelor nucleare, care evidențiază independența respectivelor forțe față de sarcina electrică și care era descrisă prin numărul cuantic de izospin T . Prin analogie, se folosește adesea și în acest cadru noțiunea de *spin izotopic slab*.

În sfârșit, raza scurtă de acțiune a interacțiilor slabe este determinată de masa proprie (de valoare ridicată) a bosonilor vectoriali intermediari.

12.10.6. CÎTEVA CONSIDERAȚII PRIVIND SISTEMATICA PARTICULELOR ELEMENTARE ȘI PROCESELE LA CARE ACESTEA PARTICIPĂ

Este necesar să subliniem că sistematica particulelor elementare a fost construită pe cale fenomenologică, folosindu-se proprietățile particulelor elementare obținute pe cale experimentală. Această sistematică separă particulele elementare pe grupări, clase și familii.

La ora actuală, respectiva etapă a fost depășită, teoriile asupra interacțiilor electromagnetice, tari și slabe reușind să explicitizeze sistematica particulelor elementare, respectiv să o pună pe seama structurilor de dublet ale leptonilor și de dublet sau triplet ale hadronilor. De aceea, după tipul interacțiilor fundamentale la care participă particulele elementare, o primă clasificare a lor ar trebui să fie de forma celei prezentate în diagrama din figura 12.10.9.

Olasificările de pînă acum s-au făcut funcție de caracteristicile intrinseci ale particulelor elementare (masă, sarcină, spin etc.), multe dintre

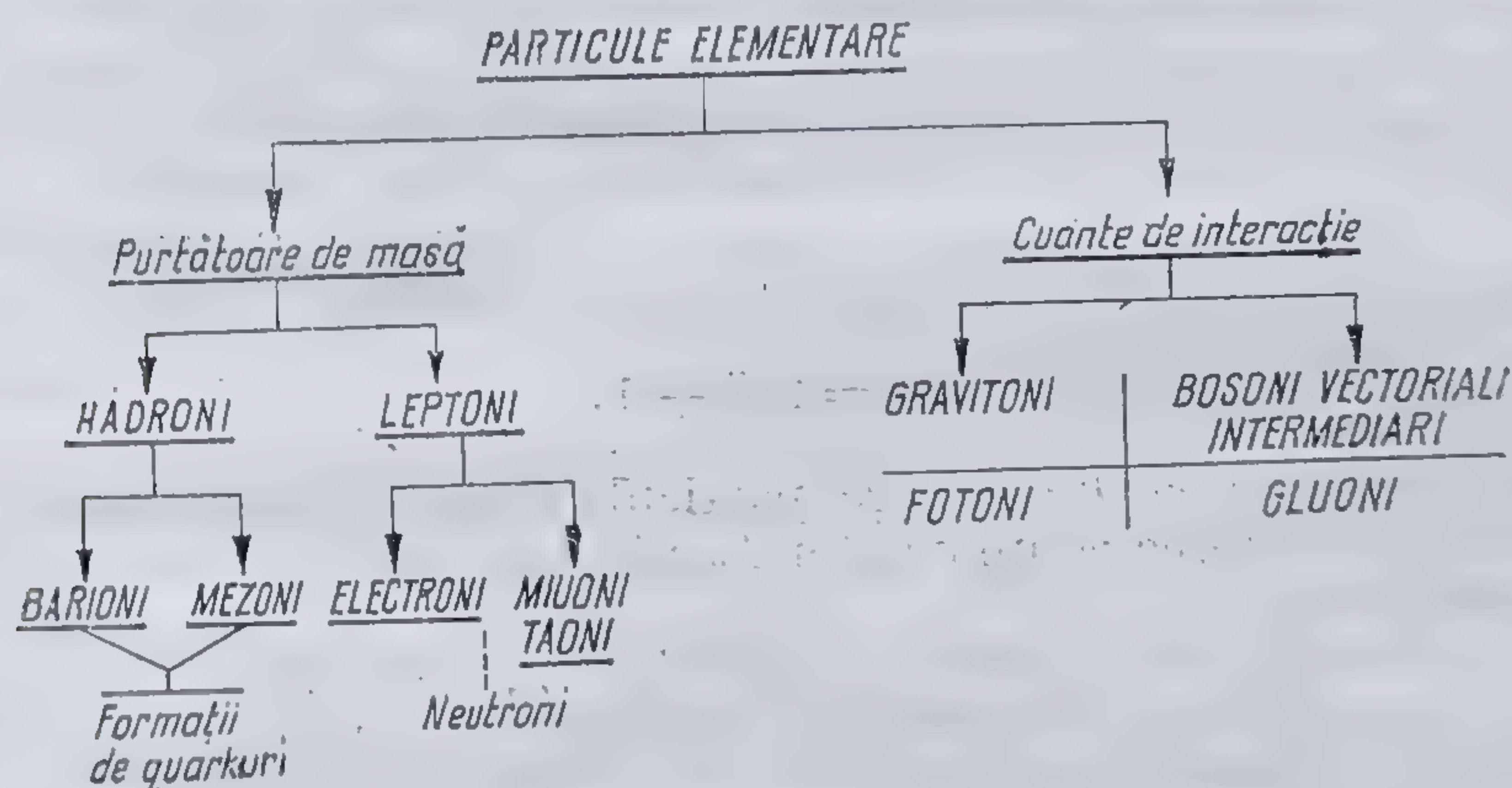


Fig. 12.10.9

aceste caracteristici fiind descrise prin numere cuantice specifice unei anumite grupări, clase sau familii de particule elementare. În general, nu se poate da o interpretare intuitivă acestor numere cuantice, un exemplu fiind reprezentat de numărul cuantic de izospin T , împreună cu com-

ponenta sa T_3 , despre care s-a vorbit în § 12.9. Dar acest exemplu nu este singular.

Clasa leptonilor este caracterizată de *numărul leptonic* L . Există trei astfel de numere și anume *numărul leptonic electronic* L_e ; *numărul leptonic miuonic* L_μ și *numărul leptonic tauonic* L_τ , ale căror valori sînt egale cu $+1$, pentru respectivii leptoni, cu -1 pentru antileptonii corespunzători și cu 0 pentru restul particulelor elementare. Aceste numere au izvorît din constatarea experimentală că în toate procesele la care participă leptoni, numărul acestora nu se modifică (întotdeauna dispariția unui lepton este însoțită de apariția altui lepton). Acest fapt experimental este exprimat de *legea de conservare a numărului leptonic*: suma algebrică a numerelor leptonice ale particulelor care intră într-un proces trebuie să fie egală cu suma algebrică a numerelor leptonice ale particulelor ce rezultă din respectivul proces. Desigur că această lege specifică grupării leptonice exprimă o simetrie interioară a acestei grupări.

În mod similar s-a introdus noțiunea de *sarcină barionică* (pe care noi am folosit-o și în descrierea nucleului atomic) și de *număr barionic* B , pentru a exprima o anumită lege de conservare specifică proceselor la care participă barionii (*nucleonii* p și n și *hiperonii*, care posedă mase proprii mai mari decît ale nucleonilor). Anume, în toate procesele la care participă barionii, suma algebrică a numerelor barionice B nu se modifică, procesele în care această sumă s-ar modifica fiind procese *interzise* (deci nu se realizează efectiv în natură). Pentru barioni $B = +1$, pentru antibarioni $B = -1$, iar pentru restul particulelor elementare, $B = 0$.

În general, însă, așa cum s-a menționat în § 12.10.3, particulele elementare dintr-o clasă și chiar dintr-o familie pot participa la mai multe tipuri de interacții fundamentale. Un exemplu tipic este cel al *particulelor strani*, care se generează în interacții tari și se dezintegrează prin interacții slabe. La început era de neînțeles de ce, de exemplu, la generarea unui hiperon straniu este absolut necesar să apară și un mezon π . Explicarea acestui fapt experimental s-a putut însă face pe baza constatării că toate familiile de particule elementare (stranii și nestranii) formează *multiple de izospin*, adică numărul n de membri ai unei familii este dat de expresia

$$n = 2T + 1. \quad (12.10.28)$$

Însăși sarcina electrică Q a fiecărei particule dintr-o familie poate fi determinată din cunoașterea componentei T_3 a izospinului. În cazul nucleonilor, de exemplu, avem

$$Q_p = \left(\frac{1}{2} + T_3\right) |e| = e; \quad Q_n = \left(\frac{1}{2} - T_3\right) |e| = 0 \quad (12.10.29)$$

deoarece $T_3 = +1/2$ pentru proton, respectiv $T_3 = -1/2$, pentru neutron. În cazul mezonilor π , s-a văzut că $T=1$, ($T_3 = \pm 1, 0$), iar în cel al mezonilor K^+ , $T = 1/2$, ($T_3 = \pm 1/2$), putîndu-se de asemenea calcula ușor sarcina electrică Q a fiecărui mezon din familie. Prin astfel de calcule, făcute cu ajutorul unor relații de forma (12.10.29), se obține că sarcina medie

Q_m a dubletului de izospin nucleonic are valoarea $Q_m = \frac{1}{2} \cdot e$. În cazul tripletului pionic se obține $Q_m = 0$, iar în cazul dubletului kaonic, $Q_{ms} = \frac{1}{2} e$. Dar, kaonii fac parte din aceeași familie de mezoni ca și pionii. Înseamnă că dubletul kaonic se distinge de tripletul pionic tocmai prin aceea că sarcina lui medie Q_{ms} este deplasată cu $\frac{1}{2} e$ față de centrul neutru

al grupării mezonice. Ca indice la sarcina medie a kaonilor s-a adăugat și litera „s” pentru a preciza că aceștia au un comportament straniu, mezonii π fiind particule nestranii. Înseamnă că diferența dintre comportamentul particulelor nestranii și stranii poate fi marcată tocmai prin această deplasare a sarcinii medii a multipletului de izospin față de centrul respectivei familii, lucru pe care l-au remarcat pentru prima dată M. Gell-Mann și Y. Nishijima. Independent unul de celălalt, ei propun, în anul 1953, folosirea noțiunii de *stranietate* pentru particulele cu comportament straniu și de *număr cuantic straniu* S , definit prin relația

$$S = \frac{2}{|e|} (Q_{ms} - Q_m). \quad (12.10.30)$$

Se obține astfel $S = 0$ pentru mezonii π ($Q_{ms} = Q_m = 0$ și deci $S = \frac{2}{|e|} (0 - 0) = 0$); $S = +1$ pentru mezonul K^+ ($Q_{ms} = \frac{1}{2} e$; $Q_m = 0$ și deci $S = \frac{2}{|e|} \left(\frac{1}{2} |e| - 0 \right) = +1$) și $S = -3$ pentru hiperonul Ω^- (întrucât $Q_{ms} = -1 |e|$; $Q_m = -\frac{1}{2} |e|$ și deci $S = \frac{2}{|e|} \left(-1 |e| - \left(-\frac{1}{2} |e| \right) \right) = -3$). Adesca, numărul cuantic S se calculează cu ajutorul expresiei

$$S = \frac{2}{|e|} (Q - T_3) - B. \quad (12.10.31)$$

Apariția simultană a două particule stranii poate, în acest caz, să fie pusă pe seama *legii de conservare a stranietății*. Dar această lege este valabilă numai pentru interacțiunile tari, nu și pentru cele slabe. La dezintegrarea particulelor stranii, stranietatea poate să varize cu $\Delta S = \pm 1$ și mai rar cu ± 2 .

În studiul particulelor elementare se folosesc frecvent și numere cuantice care se conservă în cadrul a două sau chiar trei tipuri de interacții fundamentale. *Sarcina electrică* Q se conservă în toate tipurile de interacții, iar *hipersarcina* Y se conservă numai în interacțiile electromagnetice și

tari. Numărul cuantic de hipersarcină Y este întotdeauna întreg (sau zero), fiind dat de relația

$$Y = B + S. \quad (12.10.32)$$

Un alt număr care se conservă în interacțiile tari și electromagnetice este *farmecul* c , care descrie comportamentul particulelor purtătoare de „sarcină farmec”. Se știe că acest număr este întreg și aditiv pentru respectivele particule. Desigur, ar trebui să descriem și numerele cuantice b și t , dar cunoștințele existente la ora actuală asupra acestor numere sînt încă sărace.

Să urmărim, în continuare, succint, cum pot fi folosite legile de conservare ale numerelor cuantice menționate mai sus, în stabilirea *regulilor de selecție*, respectiv a posibilităților de desfășurare (a canalelor de reacție) ale unui proces la care participă particule elementare. De exemplu, procesele :

$$Y = \begin{vmatrix} \pi^- + p \rightarrow K^0 + \Lambda^0 \\ 0 \quad +1 \quad +1 \quad 0 \end{vmatrix} \quad (12.10.33)$$

$$C = \begin{vmatrix} e^+ + e^- \rightarrow D^0 + \bar{D}^0 \\ 0 \quad 0 \quad 1 \quad -1 \end{vmatrix} \quad (12.10.34)$$

sînt *permise*, întrucît în primul se conservă hipersarcina Y , iar în al doilea farmecul c , dar procesul :

$$L_e = \begin{vmatrix} n + n \rightarrow p + p + e^- + e^- \\ 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad -1 \quad -1 \end{vmatrix} \quad (12.10.35)$$

este *interzis*, întrucît el nu conservă numărul leptonic electronic, L_e . Sînt procesul :

$$\begin{aligned} S &= \begin{vmatrix} p + p \rightarrow p + \Lambda^0 + K^+ \\ 0 \quad 0 \quad 0 \quad -1 \quad 1 \end{vmatrix} \\ B &= \begin{vmatrix} 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 0 \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (12.10.36)$$

va fi un proces permis, întrucît el conservă atât sarcina barionică B cît și straniețatea S . Va fi permisă de asemenea tranziția :

$$\begin{aligned} L_\mu &= \begin{vmatrix} K^+ \rightarrow \mu^+ + \nu_\mu \\ 0 \quad -1 \quad 1 \end{vmatrix} \\ S &= \begin{vmatrix} +1 \quad 0 \quad 0 \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (12.10.37)$$

în care numărul leptonic L_μ se conservă, iar straniețatea S variază cu $\Delta S = -1$, deoarece respectiva tranziție este determinată de interacția slabă (fiind un proces de dezintegrare în leptoni), care nu conservă straniețatea.

Exemplele prezentate mai sus pot fi completate și cu altele, dar ele sînt totuși suficiente pentru a constitui modele de felul cum pot fi stabilite *regulile de selecție* pentru un anumit proces, la care participă particule elementare.

Este desigur surprinzător și în același timp fascinant faptul că multitudinea unor astfel de procese poate fi descrisă unitar, pe baza ipotezei existenței quarcilor și a structurilor din quarci ale hadronilor. Această ipoteză ne conduce la posibilitatea explicitării simetriilor de triplet sau de octet ale multipletelor hadronici.

Privitor la aceste simetrii, merită să ne reamintim faptul că încă fizica clasică a stabilit (prin teoremele lui Noether [69]) că există o legătură indisolubilă între legile de conservare ale diverselor variabile dinamice și proprietățile de simetrie pe care trebuie să le satisfacă aceste legi. Așa, de exemplu, conservarea momentului cinetic exprimă în același timp proprietatea de izotropie a spațiului, respectiv invarianța față de operația de rotație. Rezultă atunci, că și conservarea numerelor cuantice, corespunzătoare diverselor variabile cuantice (de exemplu j pentru $\langle L_j \rangle$ sau l pentru $\langle L_l \rangle$), vor exprima legi de simetrie similare. Dar multe dintre aceste legi nu mai pot fi explicitate în cadrul unei varietăți spațio-temporale obișnuite, așa cum s-a văzut în cazul spinului izotopic. Desigur, simetrii și mai misterioase exprimă, probabil, legile de conservare ale stranieității, farmecului sau hipersarcinii. Mai mult chiar, pe lângă aceste simetrii, cărora le corespund legi de conservare ale anumitor numere cuantice, au fost puse în evidență și altele, care de asemenea constituie reguli de selecție în procesele la care participă particulele elementare. Exemplul tipic este cel al *parității spațiale*, notată prin litera P , despre care s-a vorbit în § 12.9, dar el nu este singular. Se știe că paritatea spațială se conservă în toate tipurile de interacții, în afară de interacția slabă. De notat că paritatea nu este o caracteristică aditivă (ca numerele cuantice), ci una multiplicativă, adică paritatea unui proces complex este produsul și nu suma parităților proceselor componente.

O operație de simetrie specifică numai interacțiilor tari și electromagnetice este *paritatea de sarcină*, notată prin litera C (a nu se confunda cu farmecul) și care exprimă operația de schimbare a semnului sarcinilor tuturor particulelor. Înseamnă că lumea particulelor elementare este simetrică față de schimbarea particulelor în antiparticule (numai pentru mezonii π^0 și η^0 , antiparticulele sînt identice cu particulele, la celelalte, antiparticulele posedînd sarcini de semne contrare sarcinilor particulelor). De exemplu, paritatea de sarcină a fotonului este -1 și din conservarea acestei parități, în procese de tip electromagnetic, rezultă de ce un foton nu se poate descompune în doi fotoni. Mai există și alte tipuri de operații de simetrie, unele compuse (de forma CP , de exemplu), care acționează la nivelul diverselor tipuri de interacții fundamentale și care trebuie luate în seamă la stabilirea regulilor de selecție ale proceselor la care participă particulele elementare. Dar nu vom insista în continuare asupra acestor simetrii, deoarece modul lor de operare se relevă prin acțiunea de transformare pe care o au asupra funcțiilor de undă, întocmai ca și în cazul pari-

tății P (vezi § 12.9), studiu pe care nu-l putem prezenta aici. Vom expune, în schimb, câteva probleme legate de sistematica particulelor elementare și de studiul unor proprietăți ale respectivelor particule, funcție de structura lor internă.

a) *Grupa hadronilor* este formată din două clase de particule și anume *clasa mezonilor* și *clasa barionilor*. Distincția dintre cele două clase este determinată de structura de quarci a acestora: mezonii sînt constituiți din perechi de quark-antiquark, de forma $(q \bar{q})$, manifestînd deci un comportament de tip bosonic, iar barionii (nucleonii și hiperonii) sînt compuși din formații de cîte trei quarci, manifestînd un comportament de tip fermionic, deoarece spinul lor este semiîntreg.

Atît mezonii cît și barionii se grupează în *familii* (denumite uneori și *supermultiplete* hadronici), funcție de structura lor de quarci. Asemenea familii relevă simetrii de triplet (simetria unitară $SU(3)$) și simetrii mai înalte, cum sînt *octeții mezonici și barionici*, prezentați în diagramele din figurile 12.10.10 și 12.10.11. Diagrame asemănătoare pot fi realizate și cu antihiperoni, respectiv cu rezonanțe. Aceste simetrii pun și sînt puse în evidență de structurile de quarci ale hadronilor și desigur relevă simetria de octet a cîmpului gluonic, despre care s-a vorbit mai sus.

Într-adevăr, plecînd de la ipoteza că hadronii nu pot fi decît combinații albe (fără culoare) de quarci (respectiv antiquarci) și cunoscînd

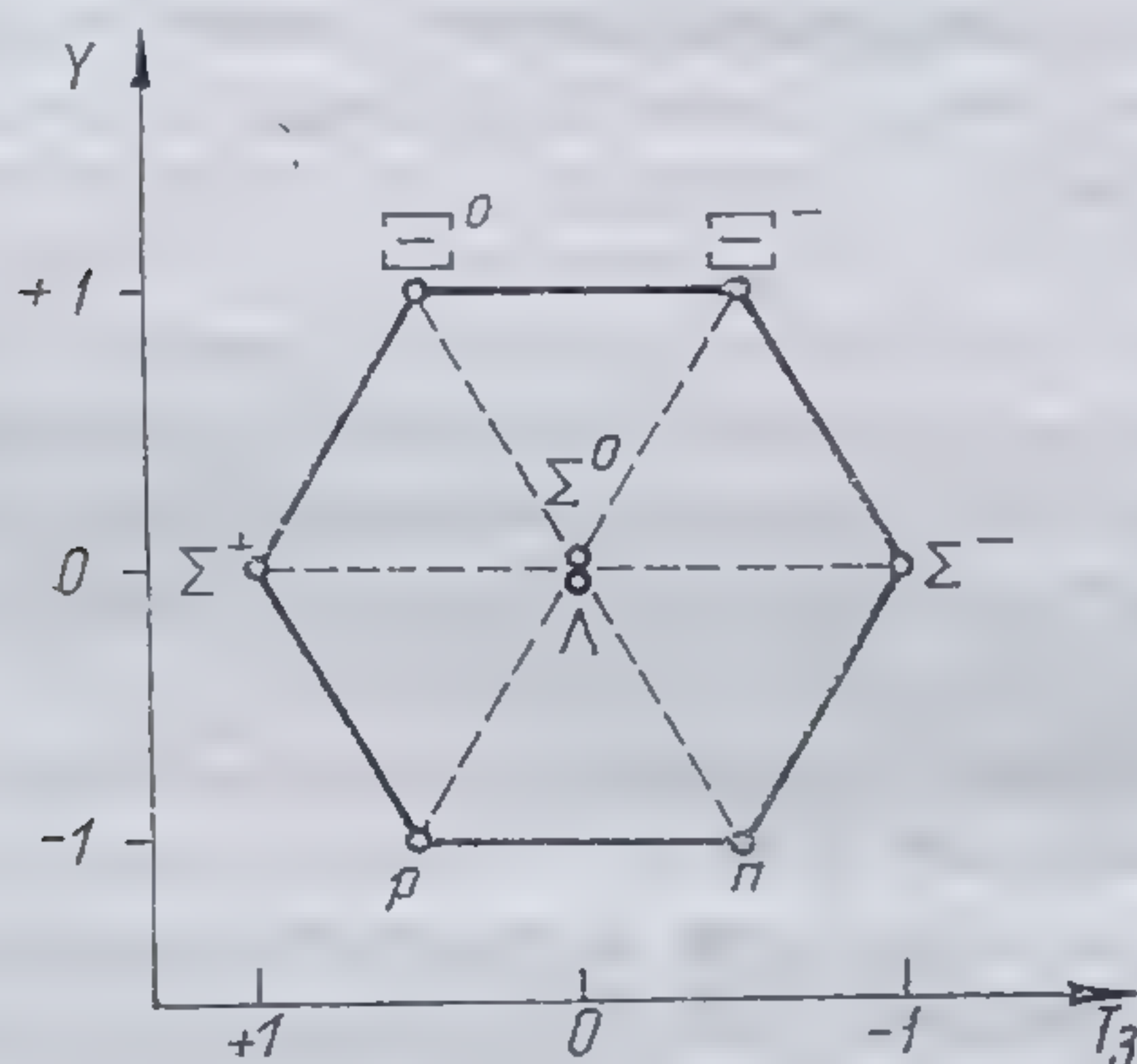


Fig. 12.10.10

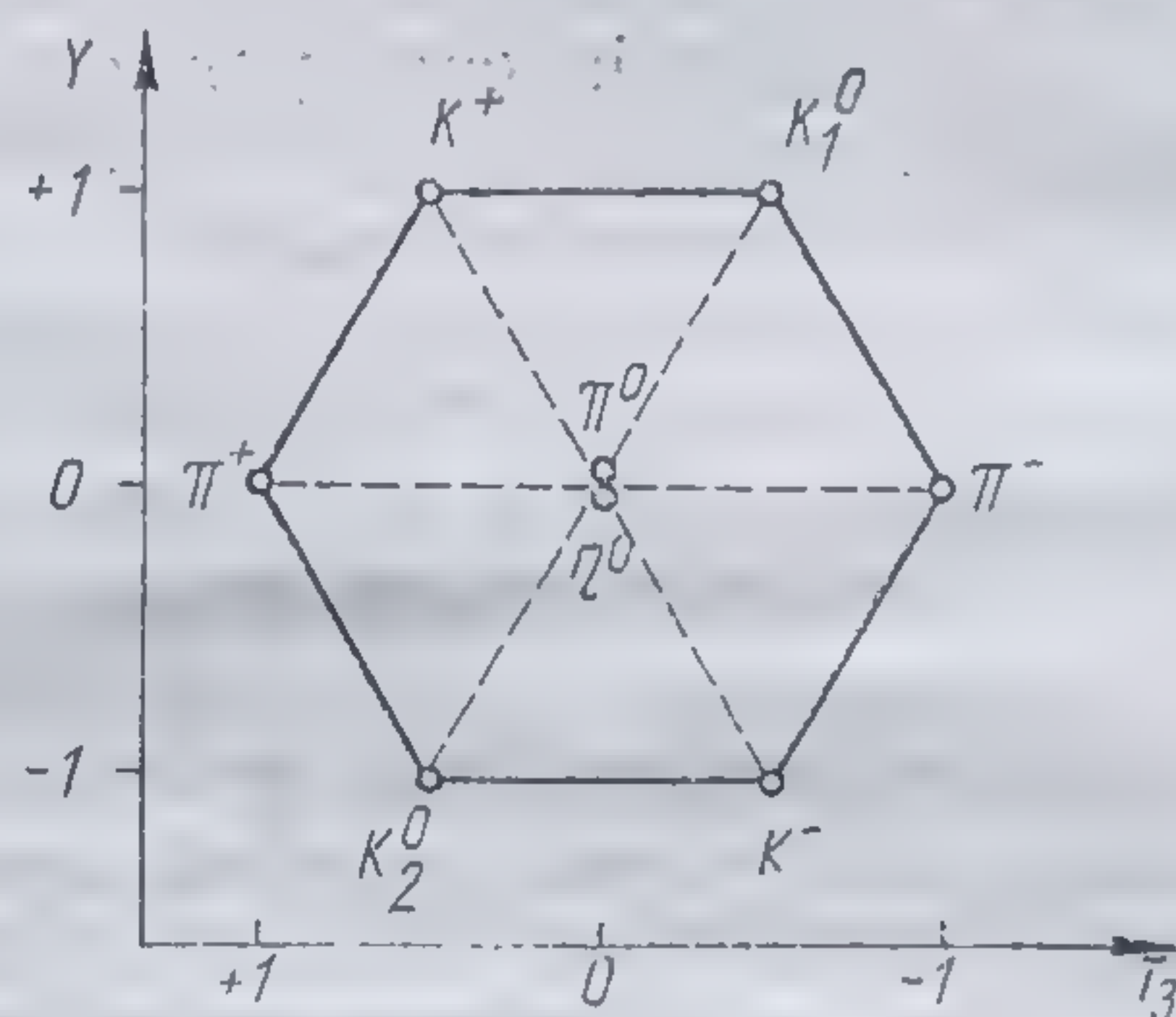


Fig. 12.10.11

numerele cuantice ale acestor particule se pot stabili ușor structurile de quarci ale hadronilor. De exemplu pentru pionul pozitiv avem

$$\pi^+ = (u\bar{d}), \text{ întrucît } Q_{\pi^+} = \frac{2}{3}e + \frac{1}{3}e = +e. \quad (12.10.38)$$

Pentru proton, în mod analog, vom avea

$$p = (uud), \text{ întrucît } Q_p = \frac{2}{3}e + \frac{2}{3}e - \frac{1}{3}e = +e \quad (12.10.39)$$

iar pentru neutron

$$n = (\bar{d}du), \text{ întrucît } Q_n = \frac{2}{3}e - \frac{1}{3}e - \frac{1}{3}e = 0. \quad (12.10.40)$$

Constituië un exercițiu simplu de calcul, stabilirea valorilor celorlalte numere cuantice ale hadronilor (B, S, Y, c etc.) pe baza cunoașterii valorilor acestor numere, corespunzătoare quarcilor ce intră în structura respectivului hadron. Potrivirea acestor valori este într-adevăr surprinzător de exactă. Dacă se adaugă la aceasta și concordanța dintre rezultatele teoretice ale cromodinamicii cuantice și cele experimentale, obținute din împrăștierea pe hadroni a electronilor de mare energie ($> 5 \text{ GeV}$) se obțin motivații destul de convingătoare privind existența quarcilor.

În experiențele de împrăștierea a electronilor pe hadroni se pun în evidență centre de împrăștierea (practic punctiforme), pe care R. Feynman le-a denumit *partoni*, dar care par a fi tocmai quarcii ce intră în structura respectivilor hadroni.

În diagrama din figura 12.10.12. este redat octetul barionic, sub forma structurilor de quarci care-l compun. Diagrame analoge se pot constitui și pentru celelalte particule, respectiv pentru antiparticulele corespunzătoare, în virtutea principiului conservării parității de sarcină. Când se folosește și rezonanțe se obțin diagrame mai complexe, de forma decupletului prezentat în diagrama din figura 12.10.4, în care se relevă atât simetria de octet, cât și simetria de triplet.

b) *Grupa leptonilor* este formată din particule care nu pot participa la interacțiile tari și, prin urmare, ele nu pot face parte din structura nucle-

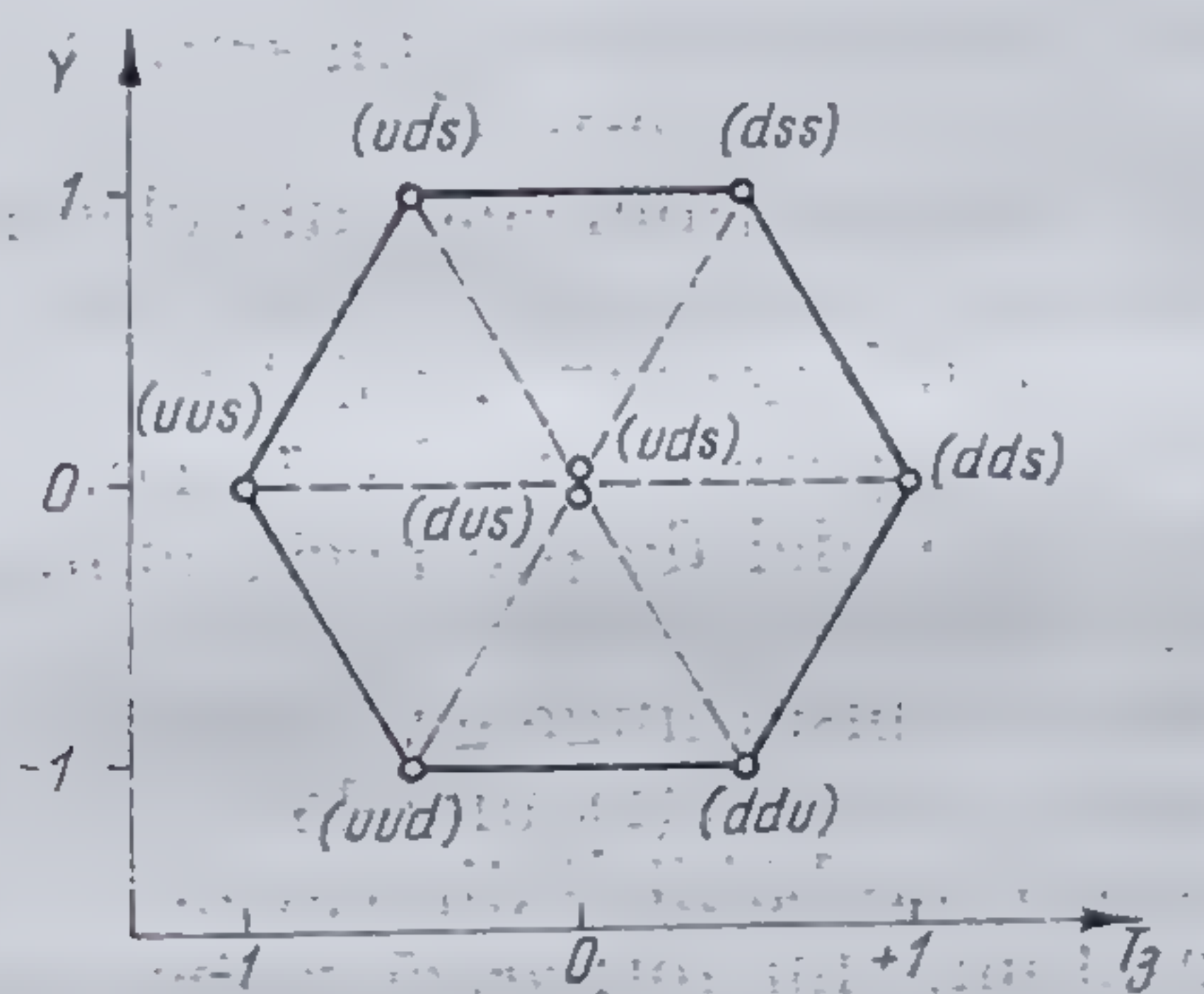


Fig. 10.12.12

ului atomic. Aceste particule se grupează în dubleți de izospin slab, de forma

$$(e^-, \nu_e); (\mu^-, \nu_\mu); (\tau^-, \nu_\tau); \quad (12.10.41)$$

pentru leptoni, respectiv de forma

$$(e^+, \bar{\nu}_e); (\mu^+, \bar{\nu}_\mu); (\tau^+, \bar{\nu}_\tau) \quad (12.10.42)$$

pentru antileptoni. Principala caracteristică a leptonilor o reprezintă conservarea numărului leptonic în procesele la care participă aceste particule. În tabelul următor sînt grupate valorile acestor numere.

Leptonul	e^-	ν_e	e^+	$\bar{\nu}_e$	μ^-	ν_μ	μ^+	$\bar{\nu}_\mu$	τ^-	ν_τ	τ^+	$\bar{\nu}_\tau$
L_e	1	1	-1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0
L_μ	0	0	0	0	1	1	-1	-1	0	0	0	0
L_τ	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	-1	-1
L	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1

Legătura, în cadrul fiecărei perechi de leptoni ca și între perechi, este realizată de cîmpul de bosoni vectoriali intermediari (W^+ și Z^0). Spre deosebire de hadroni, leptonii nu par a avea o structură interioară. De aceea, ei se consideră punctiformi și reprezintă, alături de quarci, „nivelul actual ultim” de structurare a materiei.

c) *Fotonul* este corpusculul despre care avem informațiile cele mai certe. El mediază interacția electromagnetică, nu are structură internă și alături de protoni, neutroni și electroni, intră în structura „ordinară” a materiei (cea formată din atomi și nuclee, existente în condițiile naturale de pe Terra).

d) *Gravitonul* este cuanta cîmpului gravitațional generat de masa (sarcina) gravitațională. Știm din teoria relativității generalizate că masa gravitațională este legată de curbura spațiului cvadridimensional (varietate cvadridimensională spațiu-timp, vezi § 3.7). Acest cîmp este descris de ecuații tensoriale complicate ([100, 101]), care nu au fost prezentate în cartea de față. Întrucît aceste ecuații au un caracter neliniar, problema cuantificării cîmpului gravitațional este o problemă dificilă. În ea intervin, de asemenea, singularități de tipul celor din electrodinamica cuantică. Se bănuie că în apropierea acestor singularități, în care densitatea masică poate atinge valori uriașe ($10^{97} \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$), rolul forțelor de interacție gravitațională ar trebui să fie comparabil cu al celorlalte tipuri de interacții. Dar încă nu prea știm multe nici despre acest cîmp, nici despre undele cîmpului gravitațional, respectiv despre cuantele acestor unde, care sînt gravitonii. Încercările de a depista unde gravitaționale prin mijloace oarecum similare celor folosite în detecția undelor electromagnetice (Weber, 1960) s-au soldat cu eșecuri, probabil și din cauză că aceste interacții gravitaționale (și deci gravitonii) nu formează radiații de dipol, gravitonul posedînd spinul egal cu 2.

Iată, prin urmare, cîteva din principalele informații pe care ni le oferă fizica paraticulelor elementare. Dar perspectiva istorică, dinamică, pe care ne-a oferit-o mereu dezvoltarea fizicii impune convingerea că și acest nivel de cunoaștere va fi depășit. Deja au fost formulate o serie de întrebări (teoretice sau de natură experimentală) cărora omul, cu neastîmpărul și curiozitatea sa de totdeauna, s-a și angajat să le găsească răspunsuri

adecvate. De aceea, vom încheia această carte cu prezentarea citorva aspecte legate de *teoriile unitare* din domeniul particulelor elementare, precum și de perspectivele de dezvoltare ale fizicii.

ÎNCHEIERE

Studiul diverselor tipuri de interacții fundamentale dintre particulele elementare a relevat existența mai multor analogii — între comportamentul leptonilor și cel presupus al quarcilor, de exemplu — analogii care au condus la tentativa de a uni două, trei sau chiar toate cele patru tipuri de interacții fundamentale în cadrul unui mecanism unic de interacție, realizat de o anumită cuantă de schimb. Teoriile care ar descrie un astfel de mecanism sînt cunoscute sub denumirea de *teorii unitare*.

Baza unificării tuturor tipurilor de interacții fundamentale în una singură o reprezintă faptul că toate se dezvoltă prin forțe de schimb, generate de anumite tipuri de sarcini specifice. Deoarece există posibilitatea tranzițiilor între quarci și leptoni (la anumite energii) s-a formulat ipoteza unificării forțelor electromagnetice cu cele slabe. Plasînd quarcii în același multiplet cu leptonii, de forma $(u\bar{d}\nu_e e^+)$, de exemplu, Weinberg și Salam au creat o primă teorie unificată a interacțiilor electromagnetice și slabe. Se acceptă ideea că bosonii intermediari vectoriali (W^\pm, Z^0) pot media atît interacții între leptoni (de tipul $e + \nu \rightarrow e + \nu$), cît și interacții între leptoni și quarci, de tipul $\nu + p \rightarrow \nu + p$ sau $\nu + n \rightarrow \nu + n$, dacă acestor bosoni li se atribuie o masă în valoare de peste 1000 GeV. În felul acesta a apărut celebra problemă a *dezintegrării protonului*. Protonul avînd structura (uud) există posibilitatea principială a dezintegrării lui într-un mezon π^0 (cu structura $d\bar{d}$ sau mai general $\frac{1}{\sqrt{2}}(u\bar{u} - d\bar{d})$) și un pozitron, după o schemă de forma

$$p \rightarrow \pi^0 + e^+ \rightarrow \gamma + \gamma \quad (12.10.43)$$

Calcululele conduc la concluzia că o astfel de tranziție poate fi mediată de un boson cu masa de aproximativ 10^{15} GeV, care determină un timp de viață al protonului de ordinul

$$\tau_p \approx 10^{31} \pm 1,5 \text{ ani!} \quad (12.10.44)$$

De notat că și cercetările experimentale par să confirme justetea ideii privind unificarea cîmpurilor de interacție. S-a constatat că odată cu creșterea energiei particulelor participante la un proces elementar spectrul cuantic al produselor din proces pare să fie un spectru aproape continuu. Teoretic acest lucru se exprimă prin aceea că odată cu creșterea energiei, așa-numitul *factor de formă* $F(E, p)$ [83] începe să nu mai depindă de energia E și de impulsul p al particulelor, ci numai de raportul lor E/p . Intervine o așa numită *invarianță de scară*, noțiune introdusă în anul 1969 de J. P. Bjorken, care se pare că exprimă următorul principiu general: odată cu creșterea energiei particulelor participante la un proces de interacție se

atenuează treptat structura discret cuantică a stărilor acesteia, iar în regiunea asimptotică ($E \rightarrow \infty$) intervin structuri continue. Înseamnă oare că între diversele nivele de structură intervin aceste stări continue, iar noțiunea de particulă elementară este direct legată de valoarea energiei pusă în joc în procesele specifice respectivului nivel? Iată o întrebare cărreia încă nu i s-a dat un răspuns. S-a calculat doar că cuantele care ar putea media o interacție unitară formată din interacțiile slabe, electromagnetice și tari ar trebui să aibă masa de peste 10^{14} GeV, iar cuanta cîmpului unitar supergravitațional (slab-electromagnetic-tare-gravitic) să aibă masa de peste 10^{19} GeV.

O a doua întrebare ar fi legată de posibilitățile de verificare experimentală a acestor teorii. De unde să obținem energii atât de mari pentru a separa un astfel de boson, dacă acesta ar putea exista în stare liberă? Nici la această întrebare nu s-a dat un răspuns sigur, dar se speră ca el să fie găsit pe cale indirectă, din cercetările cosmologice. Energii foarte mari înseamnă temperaturi foarte mari, iar acestea pot apare imediat după procesele cosmologice de mare intensitate. De exemplu, la energii de 1000 GeV corespunde temperatura $T = 10^{16}$ K, iar la energii de 10^{14} GeV corespund temperaturi de ordinul $T \approx 10^{27}$ K. Temperaturi de ordinul a 10^{16} K se pare că au existat imediat după „marea explozie” (Big Bang), care a condus la apariția universului nostru, aflat actualmente în expansiune. Dar de ce dovezi experimentale, privind existența acestor stări, dispunem astăzi?

Odată cu creșterea energiei bosonilor care mediază interacția crește și simetria respectivei interacții. Această concluzie este bine stabilită experimental: cu cît interacția este mai puternică, cu atît crește numărul legilor de conservare. Dar oare la nivelul quark-leptonice de structurare a materiei (A. Salam propune denumirea de „preoni” pentru constituenții acestui nivel) se poate vorbi de o simetrie Fermi-Bose, care să facă posibilă tranziția unui fermion în boson și invers? Nu cumva aceste particule sînt purtătoarele de sarcini magnetice unipolare (modelul de monopol magnetic a fost introdus de Dirac, iar pentru purtătorii de sarcină electrică și magnetică unipolare s-a propus denumirea de „dyoni”)? Ce energii trebuie să fie asociate cu aceste tranziții din stările de fermion în stările de boson și cum se pot declanșa asemenea energii?

Iată deci întrebări ale căror răspunsuri se așteaptă din investigații ulterioare. De altfel, merită să le regroupăm și pe cele pe care le-am întîlnit în diverse paragrafe ale expunerii noastre, pentru a scoate și mai bine în evidență caracterul deschis, continuu și revoluționar al procesului de cunoaștere din fizică. Ele se refereau fie la probleme principiale, teoretice, fie la probleme de interes practic [16]. Din ultima categorie fac parte:

- a) problema obținerii de noi substanțe de tipul hidrogenului metalic sau al substanțelor constituite din elemente hipergrele,
- b) problema obținerii stării supraconductoare la temperaturi mai ridicate (peste cea a azotului lichid $T = 79$ K),
- c) problema realizării sintezei termonucleare dirijate etc.

Rezolvarea acestor probleme va reprezenta desigur un progres considerabil pentru civilizația umană.

Aneax 1

NOȚIUNI DE ANALIZĂ VECTORIALĂ

1. Se numește vector al unei suprafețe elementare dS , sau suprafață vector, vectorul $d\vec{S}$, orientat în sensul normalei pozitive la suprafața dS și având modulul egal cu aria dS (fig. A1.1). Deci

$$d\vec{S} = \vec{n} dS \quad (\text{A1.1})$$

\vec{n} fiind versorul normalei pozitive la dS . Într-un sistem cartezian, $d\vec{S}$ are componentele

$$dS_x = dy dz; \quad dS_y = dz dx; \quad dS_z = dx dy \quad (\text{A1.2})$$

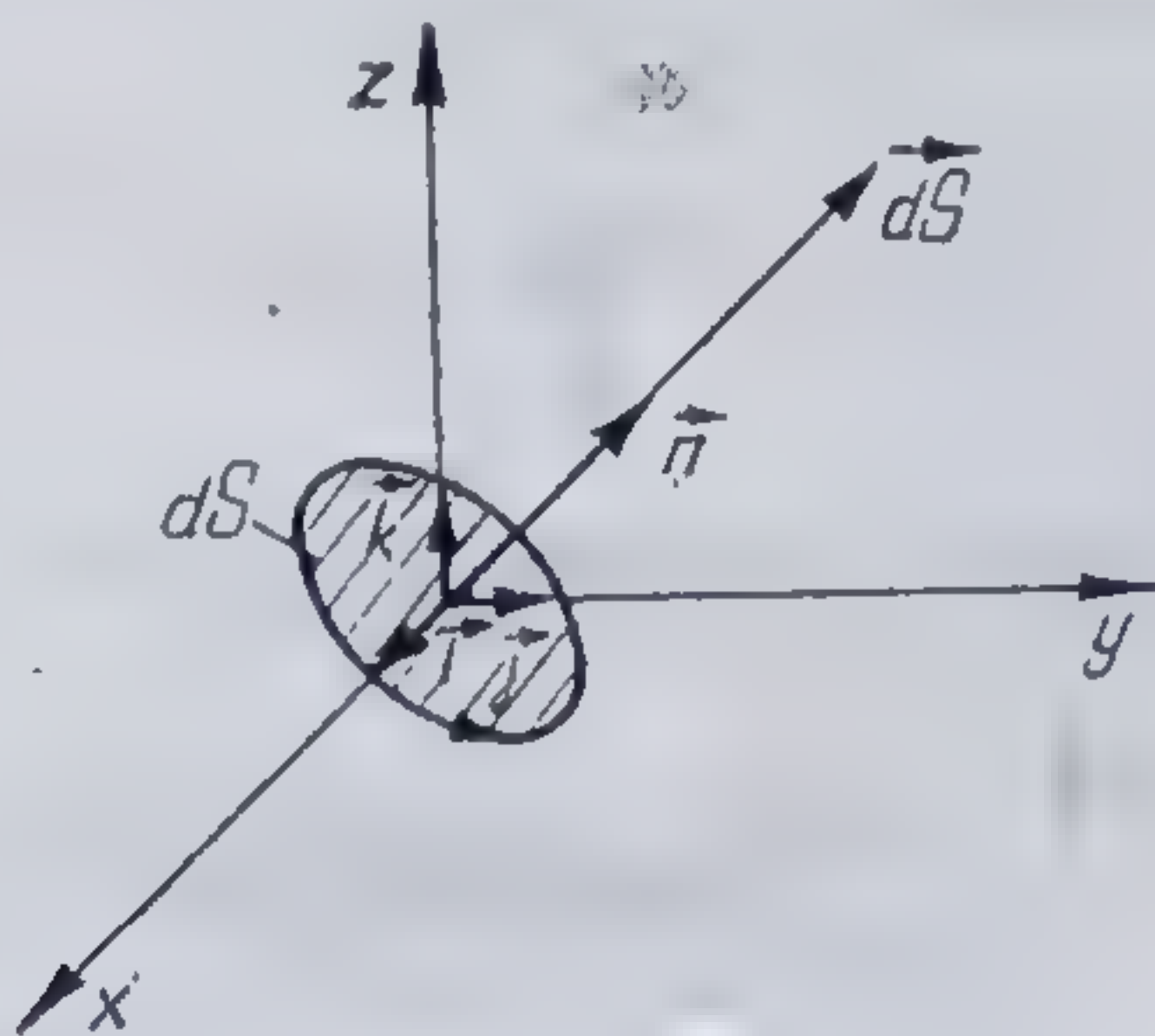


Fig. A 1.1

2. Se numește flux al unui vector \vec{E} prin suprafața dS , produsul scalar

$$d\Phi = \vec{E} d\vec{S} = E_x dy dz + E_y dz dx + E_z dx dy \quad (\text{A1.3})$$

iar printr-o suprafață închisă (S), (fig. A.1.2, a)

$$\Phi = \oint\limits_{(S)} \vec{E} d\vec{S} = \oint\limits_{(S)} (E_x dy dz + E_y dz dx + E_z dx dy). \quad (\text{A1.4})$$

Volumul V , delimitat, de suprafața închisă (S), poate fi compartimentat în celule elementare, de volum V_i și arie S_i (fig. A1.2, b). Dacă se ține seama că fluxul vectorului \vec{E} , prin pereții celulelor elementare, situați în interiorul lui (S), este nul (pentru că prin fiecare dintre acești pereți trec două fluxuri egale și de sensuri opuse), se poate scrie:

$$\oint\limits_{(S)} \vec{E} d\vec{S} = \oint\limits_{(S_1)} \vec{E} d\vec{S}_1 + \dots + \oint\limits_{(S_n)} \vec{E} d\vec{S}_n = \sum_{i=1}^n \oint\limits_{(S_i)} \vec{E} d\vec{S}_i. \quad (\text{A1.5})$$

Limita către care tinde raportul, $\frac{1}{V_i} \oint_{(S_i)} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{S}_i$, cînd volumul V_i al celulelor tinde spre zero, adică expresia

$$\operatorname{div} \mathbf{E} = \lim_{V_i \rightarrow 0} \frac{1}{V_i} \oint_{(S_i)} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{S}_i = \frac{d\Phi}{dV} \quad (\text{A1.6})$$

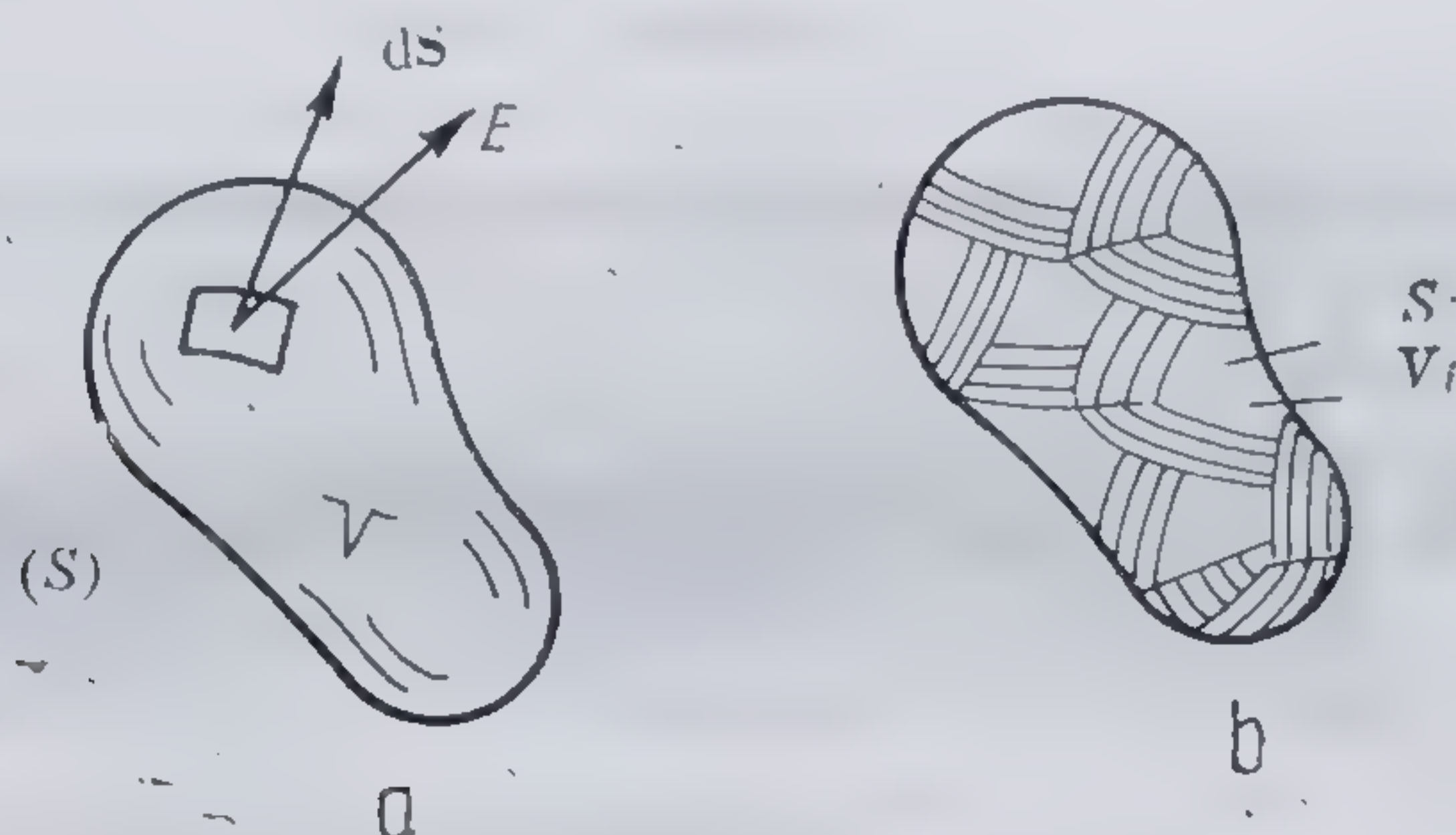


Fig. A 1.2

poartă numele de *divergență a vectorului E*. Se vede că, cu (A1.6), expresia (A1.4) se poate scrie sub forma

$$\oint_{(S)} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{S} = \iiint_V \operatorname{div} \mathbf{E} \cdot dV \quad (\text{A1.7})$$

Acastă egalitate este cunoscută sub numele de *teorema lui Gauss - Ostrogradski*.

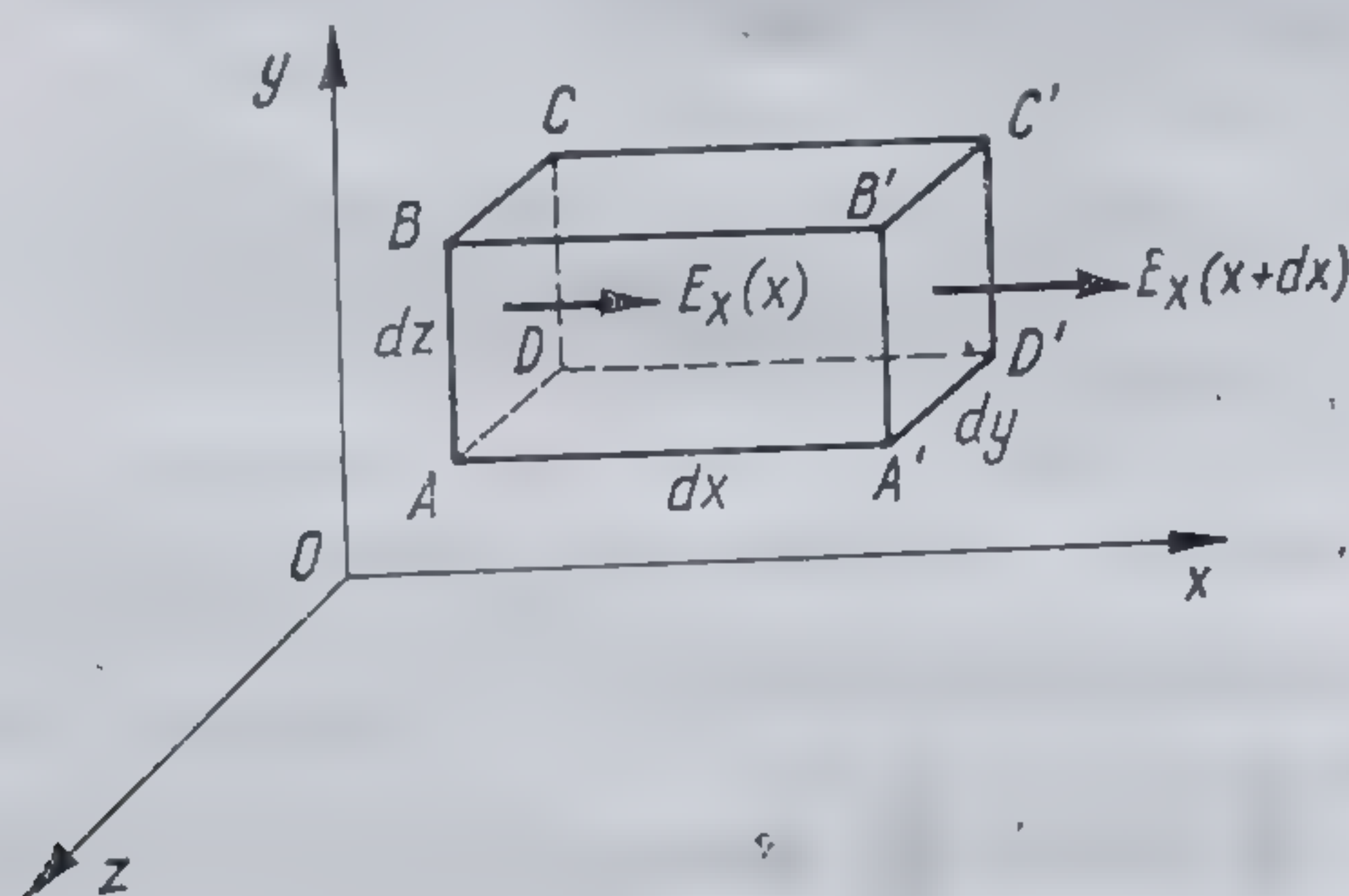


Fig. A1.3

Trebuie remarcat faptul că divergența unui vector este o mărime scalară, definită într-un punct al câmpului de vectori \mathbf{E} .

Pentru a exprima în coordonate carteziene teorema (A1.7) vom considera un element de volum $dV = dx \, dy \, dz$, de formă paralelipedică (fig. A1.3) și vom calcula fluxul vectorului $\mathbf{E}(x, y, z)$ prin suprafețele lui laterale. Avem

$$d\Phi_{ABCD} = -E_x(x) \, dy \, dz$$

$$d\Phi_{A'B'C'D'} = E_x(x + dx) \, dy \, dz = \frac{\partial E_x}{\partial x} dV + E_x \, dy \, dz$$

deci fluxul prin suprafețele normale la axa Ox este

$$d\Phi_x = \frac{\partial E_x}{\partial x} dV. \quad (A1.8)$$

Calculând, în mod analog, fluxurile vectorului \mathbf{E} prin celelalte fețe ale paralelipipedului, obținem

$$\oiint \mathbf{E} \cdot d\mathbf{S} = \iiint \left[\frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} \right] dV \quad (A1.9)$$

Prin urmare

$$\operatorname{div} \mathbf{E} = \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} = \nabla \cdot \mathbf{E} \quad (A1.10)$$

unde s-a notat prin ∇ operatorul vectorial diferențial

$$\nabla = \mathbf{i} \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial z} \quad (A1.11)$$

cunoscut sub numele de operator „nabla” *. Se observă că, de exemplu,

$$\nabla \cdot \mathbf{r} = \left(\mathbf{i} \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial z} \right) (ix + jy + kz) = 3$$

deci divergența unui vector este un scalar.

Se numește *circulație a unui vector \mathbf{F}* , în lungul unui contur închis (Γ) (fig. A1.4), integrala curbilinie

$$C = \oint_{(\Gamma)} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{l}. \quad (A1.12)$$

Compartimentând și de astă dată aria S , delimitată de conturul închis (Γ) , în celule elementare, de arie S_i și ținând seama de faptul că circulațiile pe contururile interioare conturului (Γ)

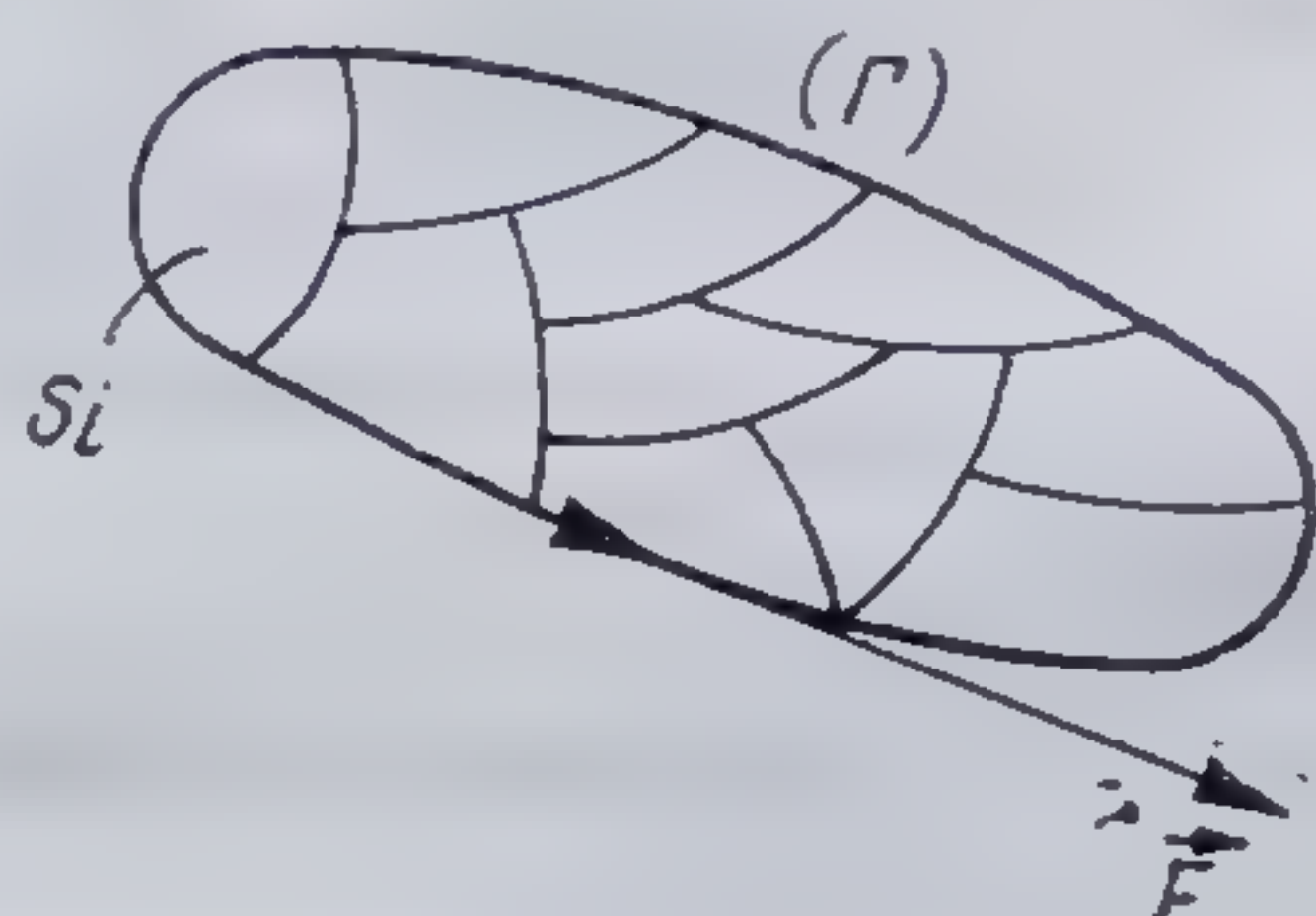


Fig. A 1.4

se anulează reciproc (acestea fiind parcurse în sensuri contrare, pentru celule vecine), putem scrie

$$\oint_{(\Gamma)} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{l} = \oint_{(\Gamma_1)} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{l}_1 + \dots + \oint_{(\Gamma_N)} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{l}_N = \sum_{i=1}^N \oint_{(\Gamma_i)} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{l}_i. \quad (A1.13)$$

* Numele provine de la un instrument muzical vechi, ceylonez, de forma acestui triunghi întors.

Limita, către care tinde raportul $\frac{1}{S_i} \oint_{(\Gamma_i)} \mathbf{F} d\mathbf{l}_i$, când $S_i \rightarrow 0$ se numește *rotor al vectorului F*

$$\text{rot } \mathbf{F} = \lim_{S_i \rightarrow 0} \frac{\oint_{(\Gamma_i)} \mathbf{F} d\mathbf{l}_i}{S_i} = \frac{dC}{dS} \quad (\text{A1.14})$$

Cu aceasta, expresia (A1.12) se va scrie sub forma :

$$\oint_{(\Gamma)} \mathbf{F} d\mathbf{l} = \iint_{(S)} \text{rot } \mathbf{F} dS \quad (\text{A1.15})$$

relație cunoscută sub denumirea de *teorema lui Stokes*.

Rotorul unui vector este o mărime vectorială. El este definit în fiecare punct al câmpului de vectori \mathbf{F} . În coordonate carteziene avem (fig. A1.5)

$$dC_{AB} + dC_{CD} = F_x(y) dx - F_x(y + dy) dx = - \frac{\partial F_x}{\partial y} dx dy \quad (\text{A1.16})$$

$$dC_{BC} + dC_{DA} = F_y(x + dx) dy - F_y(x) dy = \frac{\partial F_y}{\partial x} dx dy$$

Deci

$$\oint_{(\Gamma)} \mathbf{F} d\mathbf{l} = \iint_{(S)} \left[\left(\frac{\partial F_z}{\partial y} - \frac{\partial F_y}{\partial z} \right) dy dz + \left(\frac{\partial F_x}{\partial z} - \frac{\partial F_z}{\partial x} \right) dz dx + \left(\frac{\partial F_y}{\partial x} - \frac{\partial F_x}{\partial y} \right) dx dy \right] \quad (\text{A1.17})$$

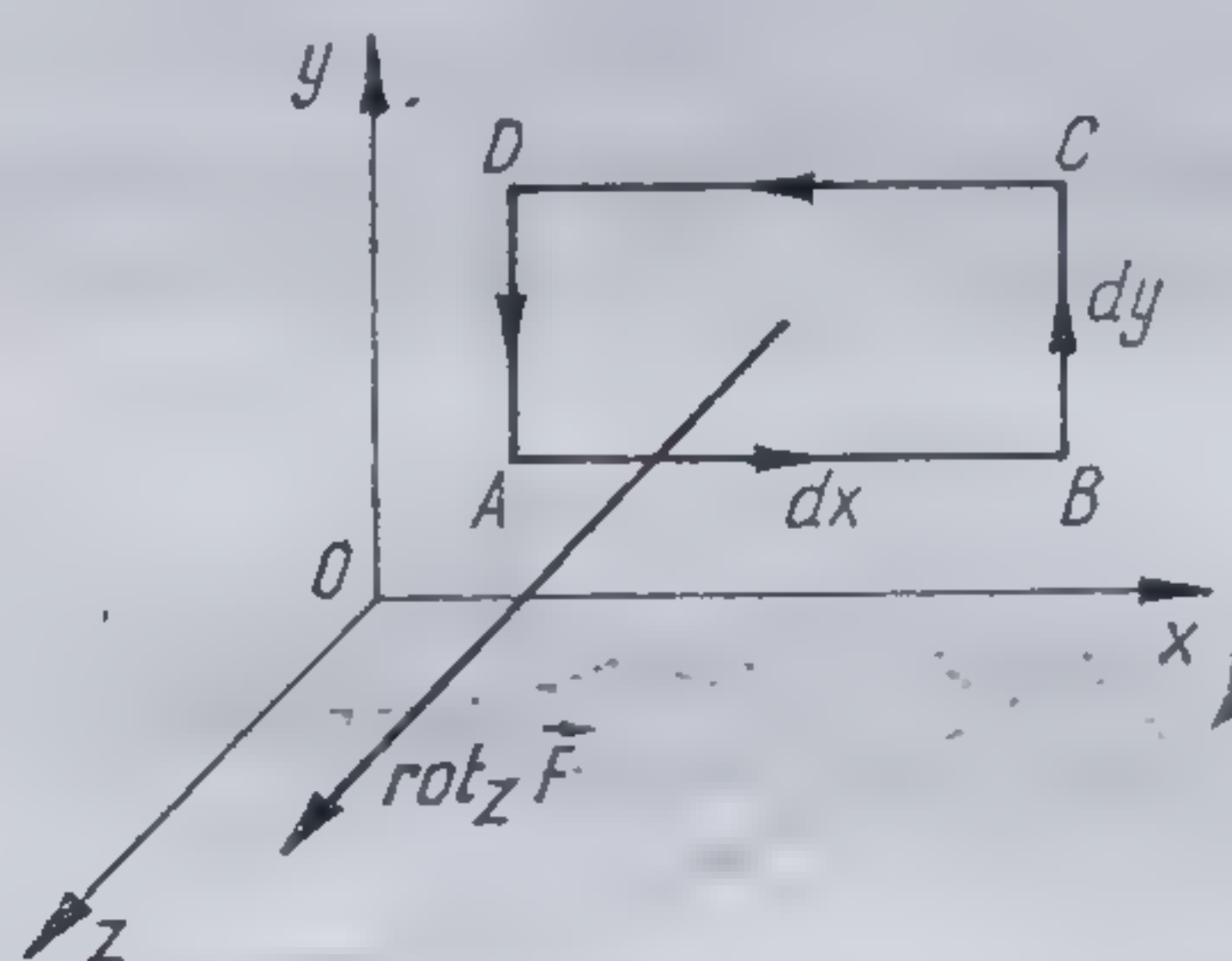


Fig. A 1.5

unde primii doi termeni din integrandul expresiei (A1.17) s-au obținut din ultimul termen, prin permutări ciclice. Înseamnă că componentele carteziene ale rotorului sînt

$$\text{rot}_x \mathbf{F} = \frac{\partial F_z}{\partial y} - \frac{\partial F_y}{\partial z}; \quad \text{rot}_y \mathbf{F} = \frac{\partial F_x}{\partial z} - \frac{\partial F_z}{\partial x}; \quad \text{rot}_z \mathbf{F} = \frac{\partial F_y}{\partial x} - \frac{\partial F_x}{\partial y}. \quad (\text{A1.18})$$

Aceste componente pot fi exprimate cu ajutorul operatorului ∇ , sub forma

$$\text{rot } \mathbf{F} = \nabla \times \mathbf{F} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ F_x & F_y & F_z \end{vmatrix}. \quad (\text{A1.19})$$

4. Se numește *gradient al unei funcții scalare* $\varphi(x, y, z)$, expresia

$$\text{grad } \varphi(\mathbf{r}) = \nabla \varphi(\mathbf{r}) = \mathbf{i} \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \mathbf{k} \frac{\partial \varphi}{\partial z}. \quad (\text{A1.20})$$

Gradientul unei funcții scalare $\varphi(\mathbf{r})$ este un vector, avînd componentele: $\nabla_x \varphi(\mathbf{r}), \nabla_y \varphi(\mathbf{r}), \nabla_z \varphi(\mathbf{r})$. Nu este greu de demonstrat că vectorul gradient este normal la suprafața $\varphi(\mathbf{r}) = \text{const.}$. Într-adevăr

$$d\varphi = \frac{\partial \varphi}{\partial x} dx + \frac{\partial \varphi}{\partial y} dy + \frac{\partial \varphi}{\partial z} dz = \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{r}} d\mathbf{r} = \nabla \varphi \cdot d\mathbf{r} = 0.$$

5. Operațiile matematice cu ∇ se pot face ușor, dacă se ține seama de faptul că acesta este un operator diferențial. Astfel, avem:

$$\text{a) } \text{div}(\varphi \cdot \mathbf{E}) = (\nabla \varphi \cdot \varphi \mathbf{E}) + (\nabla \mathbf{E} \cdot \varphi \mathbf{E}) = \mathbf{E} \nabla \varphi + \varphi \nabla \mathbf{E} = \mathbf{E} \text{ grad } \varphi + \varphi \cdot \text{div } \mathbf{E} \quad (\text{A1.21})$$

$$\begin{aligned} \text{b) } \text{rot}(\varphi \cdot \mathbf{E}) &= (\nabla \varphi \times \varphi \mathbf{E}) + (\nabla \mathbf{E} \times \varphi \mathbf{E}) = \nabla \varphi \times \mathbf{E} + \varphi \nabla \times \mathbf{E} = \\ &= \text{grad } \varphi \times \mathbf{E} + \varphi \cdot \text{rot } \mathbf{E} \end{aligned} \quad (\text{A1.22})$$

$$\begin{aligned} \text{c) } \text{div}(\mathbf{E} \times \mathbf{F}) &= \nabla_{\mathbf{E}}(\mathbf{E} \times \mathbf{F}) + \nabla_{\mathbf{F}}(\mathbf{E} \times \mathbf{F}) = \mathbf{F} \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) - \\ &- \mathbf{E} \cdot (\nabla \times \mathbf{F}) = \mathbf{F} \cdot \text{rot } \mathbf{E} - \mathbf{E} \cdot \text{rot } \mathbf{F} \end{aligned} \quad (\text{A1.23})$$

$$\begin{aligned} \text{d) } \text{rot}(\mathbf{E} \times \mathbf{F}) &= \nabla_{\mathbf{E}} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{F}) + \nabla_{\mathbf{F}} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{F}) = (\nabla_{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{F}) \mathbf{E} - \\ &- (\nabla_{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{E}) \mathbf{F} + (\nabla_{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{F}) \mathbf{E} - (\nabla_{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{E}) \mathbf{F} = (\mathbf{F} \cdot \nabla) \mathbf{E} - \mathbf{E} \\ &- \mathbf{F} \text{ div } \mathbf{E} + \mathbf{E} \text{ div } \mathbf{F} - (\mathbf{E} \cdot \nabla) \mathbf{F} \end{aligned} \quad (\text{A1.24})$$

$$\text{e) } \text{grad}(\mathbf{E} \cdot \mathbf{F}) = (\mathbf{F} \cdot \nabla) \mathbf{E} + (\mathbf{E} \cdot \nabla) \mathbf{F} + (\mathbf{F} \times \text{rot } \mathbf{E}) + \mathbf{E} \times \text{rot } \mathbf{F} \quad (\text{A1.25})$$

Se verifică ușor egalitățile:

$$\nabla \left(\frac{\mathbf{r}}{r} \right) = \frac{1}{r^3} \nabla r + \mathbf{r} \nabla \frac{1}{r^3} = \frac{3}{r^3} - \frac{3(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r})}{r^5} = 0 \quad (\text{A1.26})$$

$$\nabla \times \mathbf{r} = 0; \quad (\mathbf{E} \nabla) \mathbf{r} = \mathbf{E}; \quad \nabla \mathbf{r} = \frac{\mathbf{r}}{r}.$$

De asemenea

$$\nabla(\nabla \times \mathbf{E}) = \text{div}(\text{rot } \mathbf{E}) = 0; \quad \nabla(\nabla \varphi) = \Delta \varphi \quad (\text{A1.27})$$

unde

$$\Delta = \nabla \nabla = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (\text{A1.28})$$

reprezintă operatorul laplaceian. De asemenea, se vede că

$$\text{rot rot } \mathbf{E} = \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = \text{grad}(\text{div } \mathbf{E}) - \Delta \mathbf{E} \quad (\text{A1.29})$$

6. *Coordonatele curbilinii.* Fie q_1, q_2, q_3 , un sistem de coordonate curbilinii și ortogonale, definite în așa fel încît în elementul de lungime „ dl^2 ” să intre numai termeni în dq_1^2, dq_2^2, dq_3^2 , adică

$$dl^2 = h_1^2 dq_1^2 + h_2^2 dq_2^2 + h_3^2 dq_3^2. \quad (\text{A1.30})$$

În cazul coordonatelor sferice, de exemplu, avem $q_1 = r, q_2 = \theta$ și $q_3 = \varphi$, așa încît din

$$dl^2 = dr^2 + r^2 d\theta^2 + r^2 \sin^2 \theta \cdot d\varphi^2 \quad (\text{A1.31})$$

rezultă

$$h_1 = 1; \quad h_2 = r; \quad h_3 = r \sin \varphi \quad (\text{A1.32})$$

Atunci

$$\text{grad } \varphi = \frac{1}{h_1} \frac{\partial \varphi}{\partial q_1} + \frac{1}{h_2} \frac{\partial \varphi}{\partial q_2} + \frac{1}{h_3} \frac{\partial \varphi}{\partial q_3} \quad (\text{A1.33})$$

și

$$\text{div } \mathbf{E} = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\partial}{\partial q_1} (h_2 h_3 E_1) + \frac{\partial}{\partial q_2} (h_3 h_1 E_2) + \frac{\partial}{\partial q_3} (h_1 h_2 E_3) \right]. \quad (\text{A1.34})$$

În cazul coordonatelor sferice se obține :

$$\nabla \mathbf{E} = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial E_r}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial E_\theta}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} (r E_\varphi) \right]. \quad (\text{A1.35})$$

În mod analog se găsește expresia

$$\nabla(\nabla \psi) = \Delta \psi = \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \psi \quad (\text{A1.36})$$

deci

$$\Delta = \Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta\varphi}; \quad \begin{cases} \Delta_r = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \\ \Delta_{\theta\varphi} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \end{cases} \quad (\text{A1.37})$$

În cazul coordonatelor cilindrice, luînd

$$q_1 = r; \quad q_2 = \varphi; \quad q_3 = z \quad (\text{A1.38})$$

se obține

$$dl^2 = dr^2 + r^2 d\varphi^2 + dz^2 \quad (\text{A1.39})$$

și deci

$$h = 1; \quad h_2 = r; \quad h_3 = 1. \quad (\text{A1.40})$$

Atunci

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

În mod similar se obține, pentru coordonate polare plane

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (\text{A1.41})$$

Anexa 2

NOȚIUNI DE ALGEBRĂ MATRICEALĂ

S-a văzut că în multe probleme, atât de fizică clasică, cât și de fizică cuantică intervine noțiunea de matrice. De aceea, vom expune în această anexă câteva elemente privind definirea matricelor și operații de calcul cu matrice.

Noțiunea de matrice a apărut din studiul transformărilor de coordonate (vezi (3.7.3)), care sînt transformări liniare de forma :

$$\begin{aligned} x_1 &= a_{11} x'_1 + a_{12} x'_2 + \dots + a_{1n} x'_n \\ x_2 &= a_{21} x'_1 + a_{22} x'_2 + \dots + a_{2n} x'_n \\ &\vdots \\ x_n &= a_{n1} x'_1 + a_{n2} x'_2 + \dots + a_{nn} x'_n. \end{aligned} \quad (\text{A2.1})$$

Aceste relații pot fi scrise și sub forma

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ \vdots \\ x'_n \end{pmatrix} \quad (\text{A2.2})$$

sau condensat

$$|x\rangle = A |x'\rangle \quad (\text{A2.3})$$

În care prin $|x\rangle$ și $|x'\rangle$ au fost notați vectorii coloană care exprimă coordonatele celor două sisteme, iar prin

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad (\text{A2.4})$$

s-a notat matricea transformării respective, a cărei structură exprimă legea transformării (vezi de exemplu, matricea Lorenz (3.7.5)). Desigur, aceeași transformare (A2.1) poate fi exprimată și sub forma :

$$x_i = \sum_j a_{ij} x'_j \quad (\text{A2.5})$$

În care a_{ij} reprezintă un element al matricei A .

Matricea ale cărei elemente sînt de forma

$$a_{ij} = \delta_{ij} = \begin{cases} 1; & i = j \\ 0; & i \neq j \end{cases} \quad (\text{A2.6})$$

respectiv matricea :

$$\mathbb{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A2.7})$$

poartă numele de matrice unitară, iar matricea

$$\mathbb{D} = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad (\text{A2.8})$$

este o matrice diagonală. În sfârșit, matricea

$$\mathbb{O} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A2.9})$$

este matricea zero. Atunci, desigur, $-\mathbb{A}$ va fi matricea opusă lui \mathbb{A} , întrucît

$$\mathbb{A} - \mathbb{A} \equiv \mathbb{O}. \quad (\text{A2.10})$$

Dacă numărul elementelor de pe coloanele matricei este egal cu numărul elementelor de pe linii, atunci matricea se numește *pătrată*; altfel este o matrice dreptunghiulară.

În cazul matricelor complexe se poate defini matricea complex conjugată \mathbb{A}^* , ale cărei elemente a_{ij}^* sînt complex conjugatele elementelor a_{ij} ale matricei \mathbb{A} . Dacă se schimbă elementele liniilor cu elementele corespunzătoare ale coloanelor se obține matricea transpusă $\tilde{\mathbb{A}}$.

Se poate construi ușor o algebră matriceală, bazată pe regulile de adunare și de înmulțire ale matricelor. De exemplu, *matricea sumă* \mathbb{S} a două matrice \mathbb{A} și \mathbb{B} , adică

$$\mathbb{S} = \mathbb{A} \pm \mathbb{B} \quad (\text{A2.11})$$

este matricea ale cărei elemente sînt date de suma

$$s_{ij} = a_{ij} \pm b_{ij}. \quad (\text{A2.12})$$

În mod analog, matricea produs

$$\mathbb{P} = \mathbb{A} \cdot \mathbb{B} \quad (\text{A2.13})$$

este matricea ale cărei elemente se obțin prin înmulțirea elementelor fiecărei linii a matricei \mathbb{A} cu elementele fiecărei coloane a matricei \mathbb{B} , conform schemei

$$\begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & \dots & p_{1n} \\ p_{21} & p_{22} & \dots & p_{2n} \\ \vdots & & & \vdots \\ p_{n1} & p_{n2} & \dots & p_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \dots & b_{2n} \\ \vdots & & & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \dots & b_{nn} \end{pmatrix} \quad (\text{A2.14})$$

deci

$$p_{ij} = a_{i1}b_{1j} + a_{i2}b_{2j} + \dots + a_{in}b_{nj}.$$

Dacă

$$AB \equiv BA \quad (A2.15)$$

matricele se numesc *comutative*, iar dacă

$$A \cdot B = 0 \quad (A2.16)$$

atunci matricea

$$B = \frac{1}{A} = A^{-1} \quad (A2.17)$$

se numește *matrice inversă* a matricii A . De notat că o astfel de matrice există numai dacă determinantul matricii A este diferit de zero, adică

$$\det A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix} \neq 0 \quad (A2.18)$$

În caz contrar, matricea A se numește *singulară*.

Matricea inversă este dată de expresia

$$A^{-1} = \frac{1}{\det A} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} \\ \vdots & & & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \dots & A_{nn} \end{pmatrix} \quad (A2.19)$$

în care A_{ij} sînt complemente algebrice ale elementelor matricii transpuse \tilde{A} .

Pentru matrice complexe se mai definesc noțiunile de *matrice complex conjugată* A^* și de *matrice autoadjunctă* sau *hermitică* A^+ . Prima se obține, așa cum s-a menționat, din A înlocuind elementele sale a_{ij} cu complex conjugatele lor a_{ij}^* , iar a doua se obține prin transpunerea unei matrice complexe conjugate, adică

$$A^+ = \tilde{A}^*. \quad (A2.20)$$

De notat că înmulțirea matricelor este distributivă și asociativă și că matricele formează un grup față de operațiile de înmulțire, pentru că posedă toate proprietățile matematice ale unui grup (vezi §11.3).

Dacă pentru o matrice U este satisfăcută egalitatea

$$U U^+ \equiv U^+ U \equiv 1 \quad (A2.21)$$

atunci această matrice se numește *unitară*.

În sfîrșit, să mai notăm că suma elementelor de pe diagonala unei matrice poartă numele de *urma* (*trace*, *spur*) *matricii*. Deci

$$\text{Tr } A = \text{Sp } A = \sum_i a_{ii}. \quad (A2.22)$$

În probleme de mecanică cuantică s-a văzut (§8.1) că adesea se pune problema diagonalizării unei matrice. Această operație poate fi făcută printr-o transformare de forma

$$A' = U A U^+, \quad (A2.23)$$

denumită transformare unitară. Ea este o transformare de similitudine, care nu schimbă urma matricii.

Pentru fizică prezintă interes două probleme din algebra matriceală și anume: a) rezolvarea ecuațiilor matriceale; b) determinarea numerelor proprii și a vectorilor proprii care aparțin unei anumite matrice. O ecuație matriceală de valori proprii se scrie sub forma

$$\mathbf{A}|f\rangle = \lambda|f\rangle \quad (\text{A2.24})$$

în care $|f\rangle$ reprezintă un vector de stare coloană. El înmulțește la dreapta o matrice. În mod similar poate fi definit un vector de stare linie $\langle f|$ care va înmulți la stânga matricea \mathbf{A} și care, desigur, în mecanica cuantică a lui Dirac sînt tocmai vectorii ket și bra (vezi §8.5).

Se poate demonstra că pentru a exista un vector coloană propriu $|f\rangle$, este necesar și suficient ca valoarea proprie a matricei \mathbf{A} să fie soluție a ecuației

$$\det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{0}) = 0. \quad (\text{A2.25})$$

Aceasta este o *ecuație seculară* (sau un determinant secular, vezi §8.1). Printr-o transformare unitară, adesea matricea \mathbf{A} se diagonalizează conform relației (A2.22). Atunci, elementele de pe diagonala matricei \mathbf{A} , sînt tocmai valorile proprii ale matricei \mathbf{A} , valori care, în cazul în care prin \mathbf{A} se exprimă operatorul unei variabile cuantice, vor fi reale.

Anexa 3

CÎTEVA CONSIDERAȚII ASUPRA FUNCȚIEI δ

Funcția δ a lui Dirac sau funcția impuls δ reprezintă o generalizare a simbolului Kronecker-Weierstrass

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1, & \text{pentru } n = m \\ 0, & \text{pentru } n \neq m. \end{cases} \quad (\text{A3.1})$$

Ea a fost introdusă în anul 1926 de către Dirac pentru a putea păstra noțiunea de densitate de sarcină electrică și pentru cazul sarcinilor punctiforme. Așa, de exemplu, pentru un electron de sarcină e , presupus punctiform și localizat în punctul x_0 al unei axe Ox , se definește noțiunea de densitate liniară de sarcină prin expresia

$$\rho(x) = e\delta(x - x_0) \quad (\text{A3.2})$$

Desigur că, în acest caz, $\rho(x)$ va avea valori nule în orice punct al axei Ox , în afară de punctul $x = x_0$, în care devine infinită. De aceea, și funcția $\delta(x - x_0)$ va trebui să fie nulă în toate punctele axei Ox și să devină infinită în punctul $x = x_0$, dar în așa fel încît integrala ei pe tot domeniul de existență să aibă valoarea egală cu unitatea.

Prin urmare, funcția $\delta(x - x_0)$ este definită prin următoarele două condiții:

$$\delta(x - x_0) = \begin{cases} +\infty, & \text{pentru } x = x_0 \\ 0, & \text{pentru } x \neq x_0 \end{cases} \quad (\text{A3.3})$$

și

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) dx = 1, \quad (\text{A3.4})$$

Problemele care pot fi tratate cu ajutorul funcției δ sînt de multiple tipuri, începînd cu cele de mecanică clasică (studiul percuțiilor, de exemplu, sau al fenomenelor de rezonanță) și terminînd cu cele de fizică cuantică. În § 8.5 s-a remarcat faptul că folosind funcția δ a lui Dirac spectrele energetice cu distribuție continuă pot fi tratate prin metode similare cu spectrele discrete, iar în § 10.5 s-a arătat cum intervine funcția δ în studiul ciocnirilor cuantice. De aici nevoia de a cunoaște atît proprietățile acestei funcții, cît și a cîtorva reguli de calcul cu funcția δ .

În matematică, funcția δ este introdusă în cadrul teoriei distribuțiilor [50, 77]. Se constată că această funcție nu face parte din categoria funcțiilor analitice obișnuite. Principalele proprietăți ale funcției δ sînt următoarele:

$$\delta(x - x_0) = \delta[-(x - x_0)] \quad (\text{A 3.5})$$

$$\delta[a(x - x_0)] = \frac{1}{|a|} \delta(x - x_0) \quad (\text{A3.6})$$

$$(x - x_0) \delta(x - x_0) = 0 \quad (\text{A3.7})$$

$$\left. \begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - x_0) dx &= f(x_0) \\ \int_a^b f(x) \delta(x - x_0) dx &= f(x_0) \end{aligned} \right\} \quad (\text{A3.8})$$

$$\int \delta(x - y) \delta(x - a) dy = \delta(x - a) \quad (\text{A3.9})$$

$$\int f(x) \frac{\partial}{\partial x} [\delta(x - x_0)] dx = - \frac{\partial f(x_0)}{\partial x} = - f'(x_0). \quad (\text{A3.10})$$

$$\int f(x) \frac{\delta^{(n)}}{\partial x^n} [\delta(x - x_0)] dx = (-1)^n f^{(n)}(x_0). \quad (\text{A3.11})$$

Pentru cazul unidimensional, funcția $\delta(x)$ se poate lua de forma :

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk \quad (\text{A3.12})$$

care satisface condițiile (A3.3) și (A3.4). O astfel de expresie poate fi generalizată pentru cazul tridimensional

$$\delta(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{k} \quad (\text{A3.13})$$

respectiv la cazul n -dimensional

$$\delta(x_i) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int e^{ik_n x_n} dk_1 dk_2 \dots dk_n \quad (\text{A3.14})$$

De reținut că funcția δ poate fi privită ca limită a unei anumite funcții continue. De exemplu, plecând de la funcția

$$\delta(x, \beta) = \frac{\partial f(x, \beta)}{\partial x} = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} e^{-\beta k} \cos kx dk = \frac{\beta}{\pi(\beta^2 + x^2)} \quad (\text{A3.15})$$

unde

$$f(x, \beta) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} e^{-\beta k} \frac{\sin kx}{k} dk = \frac{1}{x} \operatorname{arctg} \frac{x}{\beta} \quad (\text{A3.16})$$

atunci se constată că

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} \delta(x, \beta) = \begin{cases} +\infty & \text{pentru } x = 0 \\ 0 & \text{pentru } x \neq 0 \end{cases} \quad (\text{A3.17})$$

și

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} \int \delta(x, \beta) dx = 1. \quad (\text{A3.18})$$

Comparând aceste rezultate cu (A3.3) și (A3.4), rezultă că putem lua

$$\delta(x) = \lim_{\beta \rightarrow 0} \delta(x, \beta). \quad (\text{A3.19})$$

Desigur că numai anumite tipuri de funcții $f(x, \beta)$ pot fi luate în considerare și anume acelea a căror derivată în raport cu x posedă valori apreciabile într-un interval restrins al domeniului de definiție al respectivei funcții și este practic nulă în afara acestui interval. Un exemplu de astfel de funcție este funcția de distribuție Fermi-Dirac, definită în § 9.4 prin expresia

$$f(E, E_F, \beta) = \frac{1}{e^{\frac{E - E_F}{kT}} + 1} = (e^{\beta(E - E_F)} + 1)^{-1} \quad (\text{A3.20})$$

Se constată, că în acest caz :

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} f(E, E_F, \beta) = \begin{cases} +1, & \text{pentru } E < E_F \\ 0, & \text{pentru } E > E_F \end{cases} \quad (\text{A3.21})$$

ceea ce înscamniă că putem lua

$$\delta(E, E_F, \beta) = - \frac{\partial f(E, E_F, \beta)}{\partial E} \quad (\text{A3.22})$$

funcția $\delta(E, E_F, \beta)$ reprezentînd tocmai panta curbei de variație a funcției $f(E, E_F, \beta)$ vezi fig. A3.1).

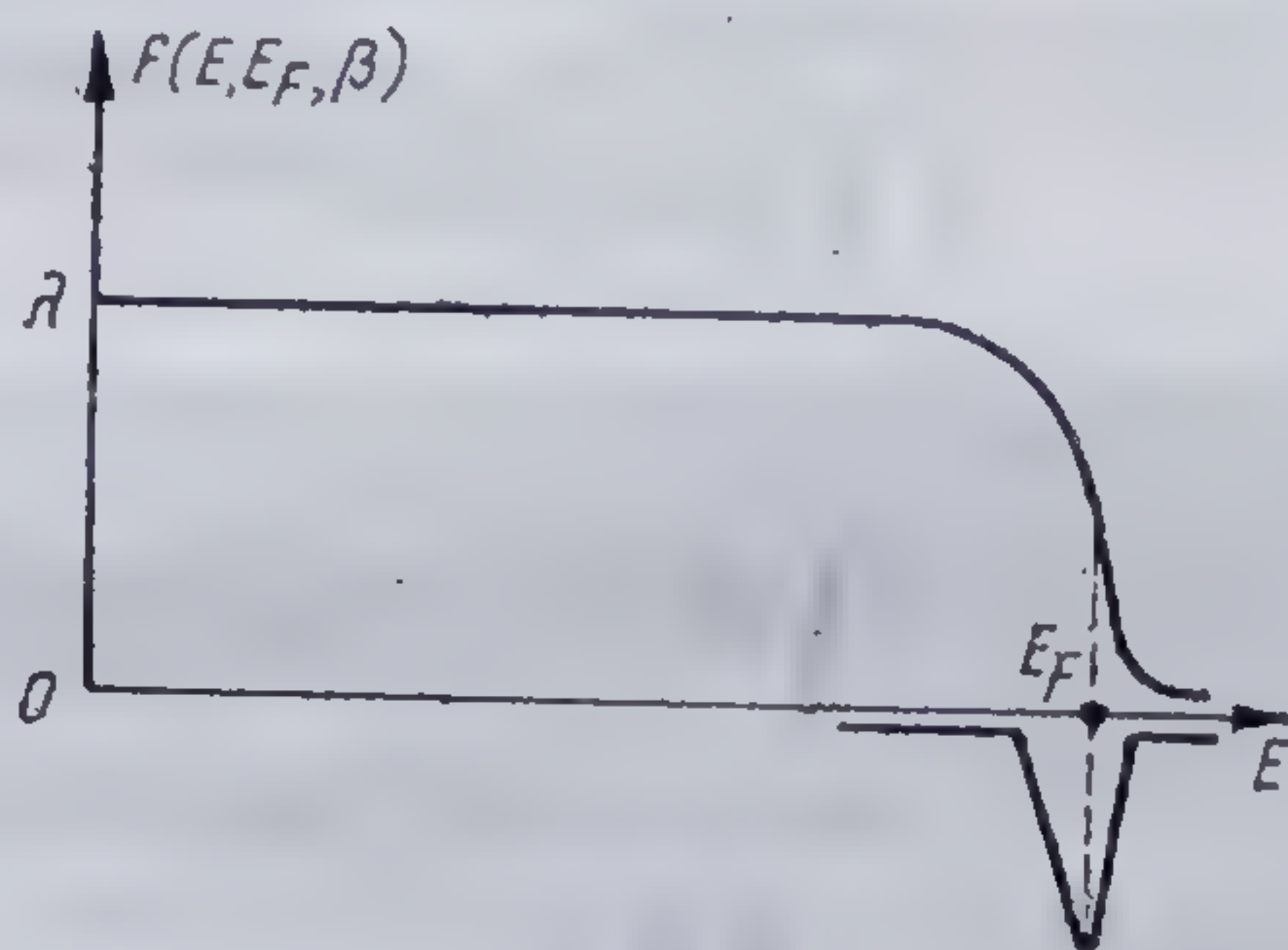


Fig. A3.1

O altă funcție limitată la un interval restrins al domeniului de variație al variabilei x este funcția care definește amplitudinea undei de grup ((vezi 6.10.58). Ea poate fi scrisă sub forma

$$f(x, \beta) = \frac{1}{\pi} \int_{-\beta}^{\beta} \frac{\sin \beta x}{x} dx. \quad (\text{A 3.23})$$

în care caz

$$\delta(x, \beta) = \frac{1}{\pi} \frac{\sin \beta x}{x}. \quad (\text{A } 3.24)$$

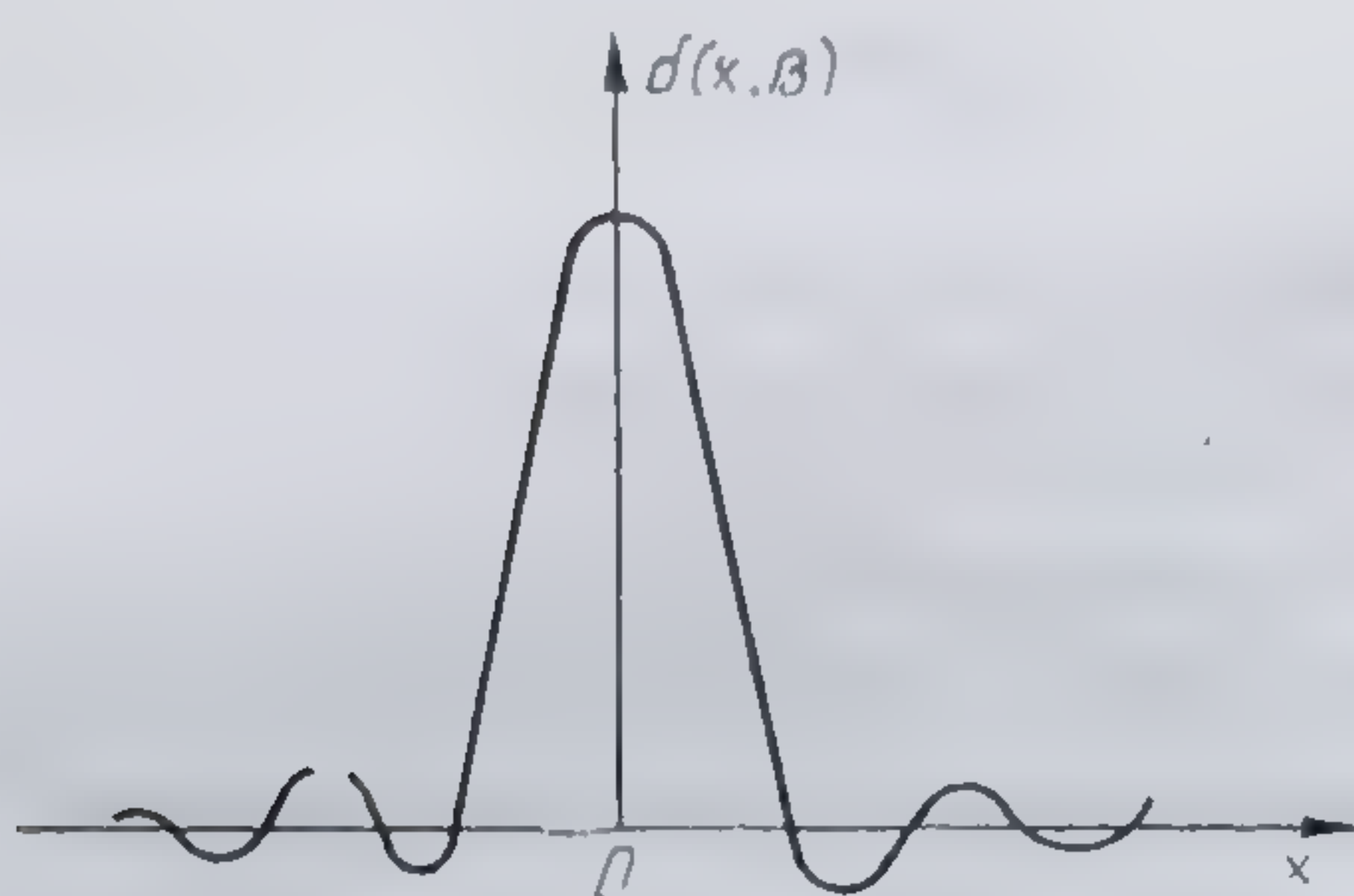


Fig. A3.2

În figura A3.2 este reprezentată grafic variația funcției $\delta(x, \beta)$, în jurul poziției $x = 0$. Se observă că această variație constă dintr-un maxim principal pronunțat și din câteva maxime secundare, de amplitudini neglijabile în comparație cu maximul principal. Prin trecerea la limită ($\beta \rightarrow \infty$) se va obține funcția $\delta(x)$, ceea ce înseamnă că această funcție va fi redată prin maximul principal, a cărui amplitudine crește indefinit, maximele secundare dispărind complet.

Așa cum s-a văzut în § 8.4, caracteristici asemănătoare funcției de amplitudine a undelor de grup au și funcțiile de undă ψ , asociate microparticulelor. În cazul existenței unui șir discret (sau continuu) de stări cuantice, funcția de undă ψ va fi dată de o dezvoltare în serie de funcții de undă proprii (vezi § 8.5), de forma

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \varphi_n(x) \quad (\text{A3.25})$$

în care coeficienții C_n sînt dați de expresia

$$C_n = \int \psi(x') \varphi_n^*(x') dx' \quad (\text{A3.26})$$

iar funcțiile φ_n satisfac condițiile standard (8.5.26) și condiția de ortonormalitate

$$\int \varphi_m^* \varphi_n dx' = \delta_{nm}. \quad (\text{A3.27})$$

De remarcat că, cu (A3.26), funcția de undă $\psi(x)$, dată de (A3.25), primește forma

$$\psi(x) = \sum_n \int \psi(x') \varphi_n^*(x') \varphi_n(x) dx'. \quad (\text{A3.28})$$

Definind funcția

$$\delta_N(x' - x) = \sum_n^N \varphi_n^*(x') \varphi_n(x) \quad (\text{A } 3.29)$$

cu condiția suplimentară ca

$$\delta(x' - x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \delta_N(x' - x) \quad (\text{A } 3.30)$$

obținem

$$\psi(x) = \int \psi(x') \delta(x' - x) dx', \quad (\text{A3.31})$$

Rezultă, din cele de mai sus, că orice set de funcții de undă ortonormate pot fi folosite pentru a obține funcția de undă δ . Vom da în continuare câteva exemple.

a) Particula în groapă unidimensională de potențial, fiind descrisă cuantic de funcția de undă

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{a} nx\right) \quad (\text{A3.32})$$

vom putea lua

$$\delta_N(x' - x) = \frac{1}{2a} \sum_{n=1}^N e^{-i\frac{\pi}{a}(x'-x)n} \quad (\text{A3.33})$$

și respectiv

$$\delta(x' - x) = \frac{1}{2a} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{\pi}{a}(x'-x)n} \quad (\text{A3.34})$$

b) Oscilatorul liniar cuantic, fiind descris de o funcție de undă de forma (8.8.53), vom avea

$$\delta(x' - x) = \sum_{v=0}^{\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{\pi} 2^v v!} \right)^{1/2} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_v(\xi); \quad \xi = \frac{x}{x_0} \quad (\text{A3.35})$$

c) Mișcarea în câmpul central al nucleului

$$\delta(x' - x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2} P_n(x') \cdot P_n(x). \quad (\text{A3.36})$$

În expresiile de mai sus prin $H_v(\xi)$ și $P_n(x)$ au fost notate polinoamele Hermite, respectiv polinoamele Legendre.

Funcția δ oferă posibilitatea determinării rapide a funcției lui Green $G(x' x)$, cu ajutorul căreia se obțin direct soluții ale ecuațiilor diferențiale liniare, de forma

$$\hat{O}f(x_1, x_2, \dots) = -\rho(x_1, x_2, \dots) \quad (\text{A3.37})$$

unde operatorul \hat{O} este dat de expresia :

$$\hat{O} = C_0 + C_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + C_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + \dots + C_i \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \dots \quad (\text{A3.38})$$

Dacă scriem densitatea $\rho(x_1, x_2, \dots)$ sub forma

$$\rho(x_1, x_2, \dots) = \int \rho(x'_1, x'_2, \dots) \delta(x'_1 - x_1, \dots) dx'_1 dx'_2 \dots \quad (\text{A3.39})$$

atunci, soluția ecuației (A3.37) poate fi scrisă astfel

$$\begin{aligned} \varphi(x_1, x_2, \dots) &= -\hat{O}^{-1} \rho(x_1, x_2, \dots) = \\ &= -\int \rho(x'_1, x'_2, \dots) \hat{O}^{-1} \delta(x'_1 - x_1, \dots) dx'_1 dx'_2 \dots \end{aligned} \quad (\text{A3.40})$$

Anexa 4

CÎTEVA CONSIDERAȚII ASUPRA FUNCȚIILOR SPECIALE

În rezolvarea ecuației lui Schördinger pentru diverse cazuri particulare am folosit adesea metoda separării variabilelor (vezi § 8.8.3), care împreună cu condițiile standard (8.5.26) au condus la obținerea unor funcții de undă proprii $\psi_n(x)$, exprimate prin funcții (sau polinoame) speciale, cum sînt funcțiile cilindrice (funcțiile Bessel) și funcțiile sferice, polinoamele Hermite, Laguerre Legendre, Cebîșev, Iacobi etc. Aceste funcții derivă din rezolvarea ecuațiilor cu derivate parțiale de ordinul al doilea prin metoda separării variabilelor, cu probleme la limită date, fiind deci des întîlnite în rezolvarea ecuațiilor fizicii matematice.

În această anexă vom expune proprietățile matematice ale citorva dintre aceste funcții speciale.

a) Funcția $\Gamma(p)$ a lui Euler este una dintre cele mai simple și mai importante funcții speciale, cu ajutorul ei putîndu-se exprima și celelalte funcții speciale. Este definită prin expresia

$$\Gamma(p) = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{p-1} dx \quad (A4.1)$$

unde p este un parametru real sau complex (dar cu parte reală pozitivă $\text{Re}(p) > 0$).

Se observă că funcția $\Gamma(p)$ poate genera factorialul, întrucît

$$\Gamma(p+1) = p \Gamma(p) = p(p-1) \Gamma(p-1) = \dots = p(p-1) \dots (p-s) \Gamma(p-s) \quad (A4.2)$$

Atunci, pentru $p = n$ întreg, putem scrie

$$\Gamma(n+1) = n! \quad (A4.3)$$

În cazul în care $p = 1/2$ se obține

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \int_0^{\infty} \frac{e^{-x} dx}{\sqrt{x}} = \sqrt{\pi} \quad (A4.4)$$

Se verifică ușor următoarele relații funcționale

$$\Gamma(p) \Gamma(1-p) = \frac{\pi}{\sin \pi p} \quad (\text{A4.5})$$

$$2^{2p-1} \Gamma(p) \Gamma\left(p + \frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi} \Gamma(2p) \quad (\text{A4.6})$$

$$\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2n-1)}{2^n} \cdot \sqrt{\pi}. \quad (\text{A4.7})$$

b) *Polinoame Hermite* $H_v(\xi)$. Aceste polinoame au fost introduse în § 8.8 în studiul oscilatorului liniar cuantic, fiind definite prin expresia

$$H_v(\xi) = (-1)^v e^{\xi^2} \frac{d^v}{d\xi^v} (e^{-\xi^2}); \quad v = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{A4.8})$$

Se obțin imediat expresiile

$$H_0(\xi) = 1; \quad H_1(\xi) = 2\xi; \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2; \quad H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi. \quad (\text{A4.9})$$

În general, polinoamele Hermite sînt date prin expresia

$$H_v(\xi) = \sum_{k=0}^{\left[\frac{v}{2}\right]} \frac{(-1)^k v!}{k! (v-2k)!} (2\xi)^{v-2k} = \sum_{k=0}^{\left[\frac{v}{2}\right]} \frac{(-1)^k \Gamma(v+1)}{\Gamma(k+1) \Gamma(v-2k+1)} (2\xi)^{v-2k} \quad (\text{A4.10})$$

termenii din sumă formînd un șir convergent. Din expresia (A4.10) rezultă imediat că

$$H_{2v}(0) = (-1)^v \frac{(2v)!}{v!}; \quad H_{2v+1}(0) = 0. \quad (\text{A4.11})$$

Polinoamele Hermite, ca dealtfel toate polinoamele și funcțiile speciale, sînt ortogonale cu ponderea $p(\xi)$, adică satisfac o condiție de formă

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(\xi) H_v(\xi) H_u(\xi) d\xi = 0 \quad (\text{A4.12})$$

cu ponderea

$$p(\xi) = e^{-\xi^2}. \quad (\text{A4.13})$$

Avînd în vedere formula de recurență

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_v^2(\xi) d\xi = 2v \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_{v-1}^2(\xi) d\xi \quad (\text{A4.14})$$

se găsește că

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_v^2(\xi) d\xi = 2^{v-1} v! \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_1^2(\xi) d\xi = 2^v v! \sqrt{\pi} \quad (\text{A4.15})$$

De aceea, funcțiile de undă de tipul

$$\psi_v(\xi) = \left(\frac{1}{2^v v! \sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} H_v(\xi) \quad (\text{A4.16})$$

formează un set de funcții ortonormate pe intervalul $(-\infty, \infty)$

Uneori este utilă cunoașterea expresiei polinomului Hermite pentru numere cuantice de vibrație v de valori ridicate. La limita $v \rightarrow \infty$, se obține așa-numita formă asimptotică a polinoamelor Hermite

$$H_{v \rightarrow \infty}(\xi) \simeq 2^{\frac{v+1}{2}} e^{-\frac{v}{2}} e^{\frac{1}{2}\xi^2} \cos \left(\sqrt{\frac{v+1}{2}} \xi - \frac{\pi v}{2} \right). \quad (\text{A4.17})$$

c) *Polinoame Legendre* $P_n(x)$. Derivă din dezvoltarea în serie a funcției (vezi (6.6.33))

$$\frac{1}{R_i} = \frac{1}{r^2 + r_i^2 - 2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}_i} = \frac{1}{r} \left[1 + \left(\frac{r_i}{r} \right)^2 - 2 \frac{r_i}{r} \cos \theta \right]^{-1/2} \quad (\text{B4.18})$$

respectiv a funcției

$$f(\rho, x) = [1 + (\rho^2 - 2\rho \cdot x)]^{-1/2}; \quad \rho = \frac{r_i}{r}; \quad x = \cos \theta. \quad (\text{A4.19})$$

Pentru $\rho < 1$ se poate scrie

$$f(\rho, x) = 1 - \frac{1}{2}(\rho^2 - 2\rho x) + \frac{\left(-\frac{1}{2}\right)\left(-\frac{3}{2}\right)}{2!}(\rho^2 - 2\rho x)^2 + \dots \quad (\text{A4.20})$$

sau concis

$$f(\rho, x) = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) \cdot \rho^n. \quad (\text{A4.21})$$

Prin calculul direct se obțin expresiile

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x; \quad P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1); \quad P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x). \quad (\text{A4.22})$$

În general

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^{(n)}}{dx^{(n)}} (x^n - 1)^n; \quad n = 0, 1, \dots \quad (\text{A4.23})$$

sau

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{\left[\frac{n}{2}\right]} \frac{(-1)^k \Gamma(2n - 2k + 1)}{2^n \Gamma(k + 1) \cdot \Gamma(n - k + 1)} x^{n-2k} \quad (\text{A4.24})$$

termenii acestei sume formînd de asemenea un șir convergent.

Deci Polinoamele Legendre sînt ortogonale pe intervalul $[-1, 1]$, cu ponderea $p(x) = 1$.

$$\int_{-1}^{+1} P_m(x) P_n(x) dx = 0; \quad m \neq n. \quad (\text{A4.25})$$

Pe baza formulei de recurență

$$(n+1) P_{n+1}(x) - (2n+1)x P_n(x) + n P_{n-1}(x) = 0; \quad n = 0, 1, \dots \quad (\text{A4.26})$$

prin câteva artificii de calcul [65] se obține că :

$$\int_{-1}^{+1} P_n^2(x) dx = \frac{2n-1}{2n+1} \int_{-1}^{+1} P_{n-1}^2(x) dx = \dots = \frac{3}{2n+1} \int_{-1}^{+1} P_1^2(x) dx = \frac{2}{2n+1}. \quad (\text{A4.27})$$

Pentru $n \rightarrow \infty$ se obține forma asimptotică a polinoamelor Legendre

$$P_{n \rightarrow \infty}(x) \simeq \left(\frac{2}{\pi n \sqrt{1-x^2}} \right)^{1/2} \sin \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) \theta + \frac{\pi}{4} \right]. \quad (\text{A4.28})$$

Adesea se folosesc și funcțiile sferice sau polinoamele Legendre asociate (vezi 10.2.54) $P_n^{(m)}(x)$, care se obțin din polinoamele Legendre $P_n(x)$, cu ajutorul formulei

$$P_n^{(m)}(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} [P_n(x)]. \quad (\text{A4.29})$$

d) *Polinoame Laguerre*. Au fost introduse în § 10.2 și sînt definite de o relație de forma

$$L_n^\alpha(x) = \frac{1}{\Gamma(n+1)} e^x x^{-\alpha} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+\alpha}); \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{A4.30})$$

Acste polinoame sînt ortogonale, cu ponderea $p(x) = e^{-x} x^\alpha$, adică

$$\int_0^\infty e^{-x} x^\alpha L_m^\alpha(x) L_n^\alpha(x) dx = 0; \quad m \neq n; \quad \alpha > -1. \quad (\text{A4.31})$$

În același timp, se poate arăta că

$$\int_0^\infty e^{-x} x^\alpha [L_n^\alpha(x)]^2 dx = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{\Gamma(n+1)}. \quad (\text{A4.32})$$

Înscamă că vor fi ortonormate funcțiile

$$R_n(x) = \left[\frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+\alpha+1)} \right]^{1/2} L_n^\alpha(x); \quad n = 0, 1, \dots \quad (\text{A4.33})$$

Forma asimptotică a acestor polinoame este

$$L_{n \rightarrow \infty}^{\alpha}(x) \simeq \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{e^{x/2} x^{\alpha/2-1/4}}{x^{\alpha/2-1/4}} \cos \left(2 \sqrt{nx} - \frac{\alpha\pi}{2} - \frac{\pi}{4} \right). \quad (\text{A4.34})$$

c) Funcțiile Bessel $J_{\nu}(x)$, intervin în legătură cu rezolvarea ecuațiilor cu derivate parțiale de ordinul al II-lea, când soluțiile au ca domeniu de existență cilindrul sau sfera. O astfel de ecuație poate fi de forma

$$y'' + \frac{1}{x} y' + \left(1 - \frac{\nu^2}{x^2} \right) y = 0; \quad \nu = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{A4.35})$$

Pentru ν întreg, soluția acestei ecuații este funcția Bessel de speța I-a

$$J_{\nu}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \left(\frac{x}{2} \right)^{n+2k}}{\Gamma(k+1) \Gamma(k+n+1)} \quad (\text{A4.36})$$

care de asemenea reprezintă o serie convergentă. Pentru $\nu = 0$ și 1 se obțin imediat expresiile

$$J_0(x) = 1 - \frac{(x/2)^2}{(1!)^2} + \frac{(x/2)^4}{(2!)^2} - \frac{(x/2)^6}{(3!)^2} + \dots \quad (\text{A4.37})$$

$$J_1(x) = \frac{x}{2} \left[1 - \frac{(x/2)^2}{1! \cdot 2!} + \frac{(x/2)^4}{2! \cdot 3!} - \frac{(x/2)^6}{3! \cdot 4!} + \dots \right]$$

De asemenea, sînt valabile următoarele relații de recurență

$$J_{\nu-1}(x) + J_{\nu+1}(x) = \frac{2\nu}{x} J_{\nu}(x) \quad (\text{A4.38})$$

$$J_{\nu-1}(x) - J_{\nu+1}(x) = 2J'_{\nu}(x)$$

iar

$$J_{-\nu}(x) = (-1)^{\nu} J_{\nu}(x) \quad (\text{A4.39})$$

Funcțiile Bessel pot fi definite și pentru indici semiîntregi, precum și pentru argumente complexe. De exemplu

$$J_{1/2}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin x; \quad J_{-1/2}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos x \quad (\text{A4.40})$$

și

$$J_{\nu}(lx) = l^{\nu} J_{\nu}(x) \quad (\text{A4.41})$$

unde

$$I_{\nu}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{\Gamma(k+1) \Gamma(k+\nu+1)} \left(\frac{x}{2} \right)^{2k+\nu} \quad (\text{A4.42})$$

Alături de funcțiile Bessel de speța I-a se mai folosesc funcțiile Bessel de speța a II-a și a III-a, numite și funcții Neumann $N_\nu(x)$, respectiv funcții Hankel de speța I-a $H_\nu^{(1)}(x)$ și a II-a, $H_\nu^{(2)}(x)$, definite prin relațiile

$$J_\nu(x) = \frac{1}{2} (H_\nu^{(1)}(x) + H_\nu^{(2)}(x)) \quad (\text{A4.43})$$

$$N_\nu(x) = \frac{1}{2i} [H_\nu^{(1)}(x) - H_\nu^{(2)}(x)]$$

unde

$$N_\nu(x) = \frac{J_\nu(x) \cos \pi \nu - J_{-\nu}(x)}{\sin \pi \nu}. \quad (\text{A4.44})$$

Se vede că

$$H_\nu^{(1)}(x) = J_\nu(x) + iN_\nu(x); \quad H_\nu^{(2)}(x) = J_\nu(x) - iN_\nu(x). \quad (\text{A4.45})$$

Și aceste funcții satisfac formule de recurență de tipul (A4.38), posedă forme asimptotice și sînt ortonormate.

Anexa 5

CÎTEVA GRUPURI PUNCTUALE DE SIMETRIE, CLASELE LOR DE ECHIVALENȚĂ ȘI TABLELE DE CARACTERE ALE REPREZENTĂRILOR LOR IREDUCTIBILE

$$1) \quad \begin{array}{c|c} 1 = C_1 & E \\ \hline \Gamma_1 & 1 \end{array}$$

$$2) \quad \begin{array}{c|cc} 2 = C_2 & E & 2 \\ \hline \Gamma_1 & 1 & 1 \\ \Gamma_2 & 1 & -1 \end{array}$$

$$3) \quad \begin{array}{c|ccc} 3 = C_3 & E & 3 & 3^2 \\ \hline \Gamma_1 & 1 & 1 & 1 \\ \Gamma_2 & 1 & \epsilon & \epsilon^* \\ \Gamma_3 & 1 & \epsilon^* & \epsilon \end{array}$$

$$\epsilon = e^{\frac{2\pi i}{3}}; \quad \epsilon^* = e^{-\frac{2\pi i}{3}}$$

$$4) \quad \begin{array}{c|cccc} 4 = C_4 & E & 4 & 4^2 = 2 & 4^3 \\ \hline \Gamma_1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ \Gamma_2 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ \Gamma_3 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ \Gamma_4 & 1 & -1 & -1 & 1 \end{array}$$

5)

$6 = C_6$	E	6	$6^2 = 3$	$6^3 = 2$	$6^4 = 3^2$	6^5
${}^1\Gamma_1$	1	1	1	1	1	1
${}^1\Gamma_2$	1	ω	$-\omega^*$	-1	$-\omega$	ω^*
${}^1\Gamma_3$	1	$-\omega^*$	$-\omega$	1	$-\omega^*$	$-\omega$
${}^1\Gamma_4$	1	1	-1	-1	1	-1
${}^1\Gamma_5$	1	$-\omega$	$-\omega^*$	1	$-\omega$	$-\omega^*$
${}^1\Gamma_6$	1	ω^*	$-\omega$	-1	$-\omega^*$	ω

$$\omega = e^{\frac{\pi i}{3}}; \quad \omega^* = e^{-\frac{\pi i}{3}}$$

6)

$\bar{2} = S_2$	E	I
${}^1\Gamma_1$	1	1
${}^1\Gamma_2$	1	-1

$4 = S_4$	E	$\bar{4} = S_4$	$2 = C_2$	$4^3 = S_4^3$	$222 = D_2$	E	$2^x = C_2^x$	$2^y = D_2^y$	$2^z = D_2^z$
${}^1\Gamma_1$	1	1	1	1	${}^1\Gamma_1$	1	1	1	1
${}^1\Gamma_2$	1	i	-1	-i	${}^1\Gamma_2$	1	1	-1	-1
${}^1\Gamma_3$	1	-1	1	-1	${}^1\Gamma_3$	1	-1	1	-1
${}^1\Gamma_4$	1	-i	-1	i	${}^1\Gamma_4$	1	-1	-1	1

$\frac{2}{m} = C_{2h}$	E	$2 = C_2$	$I_1 = C_{1h} = \sigma_h$	I
${}^1\Gamma_1$	1	1	1	1
${}^1\Gamma_2$	1	-1	-1	1
${}^1\Gamma_3$	1	1	-1	-1
${}^1\Gamma_4$	1	-1	1	-1

$23(3) = T$	E	$3C_2$	$4C_3$	$4C_3^2$
${}^1\Gamma_1$	1	1	1	1
${}^1\Gamma_2$	1	1	ε	ε^2
${}^1\Gamma_3$	1	1	ε^2	ε
${}^1\Gamma_4$	3	-1	0	0

$$\varepsilon = e^{\frac{2\pi i}{3}}$$

Anexa 6

Principalele particule și antiparticule

Denumirea și simbolul particulei	Masa particulei (MeV)	Timpul de viață τ (s)	Spinul I	Izo- spinul T	Sarcina electrică Q (în e)	Sarcina barionică B	Stranie- tatea S	Far- mecul c	Sarcina leptonică		
									L_e	L_μ	L_τ
Fotonul γ	0	stabil	1	0	0	0	0	0	0	0	0
Leptoni	Neutrini electro- nici $\nu_e, \bar{\nu}_e$	$< 35 \text{ eV}$ $14 < m_{\nu_e} < 46 \text{ eV}$	stabili	1/2	0	0	0	0	± 1	0	0
	Neutrini miuonici $\nu_\mu, \bar{\nu}_\mu$	$< 0,52 \text{ eV}$	„	1/2	0	0	0	0	0	± 1	0
	Neutrini taonici $\nu_\tau, \bar{\nu}_\tau$?	„	1/2	0	0	0	0	0	0	± 1
	Electron e^-	0,511	stabil	1/2	0	-1	0	0	+1	0	0
	Pozitron e^+	0,511	„	1/2	0	+1	0	0	-1	0	0
	Miuoni μ^-, μ^+	105,659	$2,197 \cdot 10^{-6}$	1/2	0	∓ 1	0	0	0	± 1	0
	Taoni τ^-, τ^+	1784,2	$(4,6 \pm 1,9) \cdot 10^{-13}$	1/2	0	∓ 1	0	0	0	0	± 1
Mezoni	Mezoni π^\pm	139,567	$2,603 \cdot 10^{-8}$	0	1	± 1	0	0	0	0	0
	Mezon π^0	134,963	$0,83 \cdot 10^{-10}$	0	1	0	0	0	0	0	0
	Mezon η	548,82	$1,25 \cdot 10^{-18}$	0	0	0	0	0	0	0	0
	Mezoni K^+, K^-	493,667	$1,237 \cdot 10^{-8}$	0	1/2	± 1	0	± 1	0	0	0
	Mezoni K_0, \bar{K}_0	497,67	$5,18 \cdot 10^{-8}$	0	1/2	0	± 1	0	0	0	0

Anexa 6 (continuare)

Denumirea și simbolul particulei	Masa particulei (MeV)	Timpul de viață τ (s)	Spinul I	Izo- spinul T	Sarcina electrică Q (în e)	Sarcina barionică B	Stranie- tatea S	Par- ame- ntul c	Sarcina leptonică		
									L_e	L_μ	L_τ
Nucleoni											
Protoni p, \bar{p}	938,2796	stabili	1/2	1/2	-1	± 1	0	0	0	0	0
Neutroni n, \bar{n}	939,5731	925 ± 11	1/2	1/2	0	± 1	0	0	0	0	0
Hiperoni											
$\Lambda^0, \bar{\Lambda}^0$	1115,60	$2,63 \cdot 10^{-10}$	1/2	0	0	± 1	∓ 1	0	0	0	0
Hiperoni $\Sigma^+, \bar{\Sigma}^-$	1189,36	$0,8 \cdot 10^{-10}$	1/2	1	± 1	± 1	\mp	0	0	0	0
Hiperoni $\Sigma^-, \bar{\Sigma}^+$	1197,34	$1,48 \cdot 10^{-10}$	1/2	1	∓ 1	± 1	∓ 1	0	0	0	0
Hiperoni $\Sigma^0, \bar{\Sigma}^0$	1192,46	$5,8 \cdot 10^{-10}$	1/2	1	0	± 1	∓ 1	0	0	0	0
Hiperoni $\Xi^-, \bar{\Xi}^+$	1321,32	$1,64 \cdot 10^{-10}$	1/2	1/2	∓ 1	± 1	∓ 2	0	0	0	0
Hiperoni $\Xi^0, \bar{\Xi}^0$	1314,9	$2,9 \cdot 10^{-10}$	1/2	1/2	0	± 1	∓ 2	0	0	0	0
Hiperoni $\Omega^-, \bar{\Omega}^+$	1672,45	$0,82 \cdot 10^{-10}$	3/2	0	∓ 1	-1	3	0	0	0	0

Barioni

BIBLIOGRAFIE

1. ARTIMOVICI, L. A., *Reacții termonucleare dirijate* (trad. din lb. rusă), Ed. Tehnică, București, 1964.
2. BALLY, D., *Metode fizice în studiul corpului solid*, Ed. didactică și pedagogică, București, 1966.
3. BALLY, D. ș.a., *Împrăștierea razelor X și a neutronilor*, Ed. Tehnică, București, 1972.
4. BARB, D., *Efectul Mössbauer și aplicațiile sale*, Ed. Acad. R.S.R., București, 1972.
5. BARRET, G. S., MORSALSKI, T. B., BOKSTEIN, B. S., *Difuzia în metale*, Metallurgia, Moskva, 1978.
6. BĂDĂRĂU, E., POPESCU, I. I., *Gaze ionizate*, vol. I și II, Ed. Tehnică, București, 1963—64.
7. BERINDE, A., VLĂDUCĂ, GH., *Reacții nucleare neutronice în reactor*, Ed. Tehnică, București, 1978.
8. BLOHINTEV, D. I., *Osnovi kvantovoi mehaniki*, Nauka, Moskva, 1976.
9. BORN, M., *Fizica atomică*, Ed. științifică (trad. din lb. engleză), București, 1973.
10. BOROVIC, E. S., MILNER, A. S., EREMENKO, V. V., *Lecții po magnetisma*, Harkov, 1972.
11. BRÂNDUȘ, I., CORCIOVEI, A., IOSIFESCU, M., SĂNDULESCU, A., *Elemente de teoria nucleului*, Ed. Tehnică, București, 1969.
12. de BROGLIE, L., *Certitudinile și incertitudinile științei* (trad. din lb. franceză), Ed. Politică, București, 1980.
13. BUNGET, I., *Fizica dielectricilor*, Univ, București, 1971.
14. BURZO, E., *Fizica fenomenelor magnetice*, vol. I, și II., Ed. Acad. R.S.R., București, 1980—1983.
15. CEAUȘESCU, NICU, *Contribuții la fizica și aplicațiile descărcărilor luminescente*, Ed. Acad. R.S.R., București, 1982.
16. CEAUȘESCU, NICU, POPESCU, I., *Tehnologii neconvenționale*, Ed. Scrisul românesc, Craiova, 1982.
17. CIOBANU, GH. ș.a., *Fizica stării solide*, Ed. Tehnică, București, 1982.
18. CIORĂSCU, FL., ONCESCU, M., *Detectarea și măsurarea radiațiilor nucleare*, Ed. Acad. R.S.R., București, 1964.
19. CREȚU, TR., PREDA, M., GHIZDEANU, GH., *Fizica*, Ed. didactică și pedagogică, București, 1974.
20. CREȚU, TR., *Fizica generală*, vol. I, Ed. Tehnică, București 1984.
21. CRIȘAN, M., *Teoria cuantică a magnetismului*, Ed. Dacia, Cluj-Napoca, 1977.
22. CUCULEANU, V., *Fizica și calculul reactorilor nucleari cu neutroni rapizi*, Ed. Tehnică, București, 1982.
23. CUCUREZEANU, I., *Laseri*, Ed. Acad. R.S.R., București, 1966.

24. DAMASK, A., DIENES, J., *Tocecnîie defectî v metallah*, Mir, Moskva, 1966
25. DAVÍDOV, A. S., *Teoria corpului solid* (trad. din lb. rusă), Ed. Științifică și Enciclopedică, București, 1980.
26. DĂNILĂ, C., *Centrale nucleare-electrice*, Ed. Acad. R.S.R., București, 1973.
27. DIMA, I., MUNTEANU, I., *Materiale și dispozitive semiconductoare*, Ed. didactică și pedagogică, București, 1974.
28. DIRAC, P. A. M., *The Principles of Quantum Mechanics*, Clarendon Press, Oxford, 1958.
29. DOLOCAN, V., *Fizica dispozitivelor cu corp solid*, Ed. Acad. R.S.R., București 1979.
30. DUMITRU, S., INȚA, I., IONAȘCU, N., MUNTEANU, G., SOITU, C., VISEROIU, R., *Fizica*, Vol. 1—3, Univ. Brașov, 1983.
31. DUMITRU, S., *Microfizica* Ed. Dacia, Cluj-Napoca, 1984.
32. EVANS, E. P., *The Atomic Nucleus*, Mc Graw-Hill, New York, 1955.
33. FEYNMAN, R., *Fizica modernă*, vol. 1,2,3, (trad. din lb. engleză), Ed. Tehnică, București, 1970—1972.
34. FIUCIUC, N., *În lumea atomului*, Ed. Albatros, București, 1983.
35. FOCK, V. A., *Zs. für Phys.*, 61, 126 1930.
36. FRENKEL, I., *Introducere în teoria metalelor* (trad. din lb. rusă), Ed. Tehnică, București, 1954.
37. GEORGESCU, I., PETREA, I., BORȘAN, D., *Fizica stării lichide*, Ed. didactică și pedagogică, București, 1982
38. GHERMAN, O., SALIU, L., *Fizica statistică*, Ed. Tehnică, București, 1976.
39. GHINZBURG, V. L., *The Problem of High Temperature Superconductivity*, Annual Review of Materials Science, 2, 663, 1973.
40. HARTREE, D. R., *Proc. Comb. Phil. Soc.*, 24, 89, 1928.
41. HAYDOCK, R., *J. Phys. C., Solid State Physics*, 14, 3807, 1981.
42. HOLLINGSWORTH, C. A., *Vectors Matrices and Group Theory for Scientists and Engineers*, Mc Graw-Hill, New York, 1967.
43. HOLSTEIN, L. H., PRIMAKOFF, H., *Phys. Rev.*, 58, 1098, 1940.
44. INȚA, I., DUMITRU, S., *Complemente de fizică*, vol. 1, Ed. Tehnică, București, 1982.
45. INȚA, I., *Fizica*, vol. 2, Univ. din Brașov, 1980.
46. INȚA, I., *St. Cerc. Fizică*, 4, 23, 369, 1971.
47. INȚA, I., *Rev. Roum. Phys.*, 5, 16, 535, 1971.
48. INȚA, I., *Rev. Roum. Phys.*, 2, 16, 255, 1971.
49. INȚA, I., s. a., *Șt. Cerc. Fizică*, 22, 279, 1980.
50. IVANENKO, D., SOCOLOV, A., *Teoria clasică a câmpului* (trad. din lb. rusă), Ed. Tehnică, București, 1955.
51. IVAȘCU, M., POIENARU, D. N., *Energia de deformare a formei nucleelor*, Ed. Acad. R.S.R., București, 1981.
52. JONES, H., *The Theory of Brillouin Zones and Electronics States in Crystals*, Noth Holland, Amsterdam, 1960.
53. KAPTOV, N. A., *Electronica* (trad. din lb. rusă), Ed. Tehnică, București, 1956.
54. KASTLER, A., *Această stranie materie* (trad. din lb. franceză), Ed. Politică, București, 1982.
55. KIREEV, P. S., *Fizica semiconductoarelor* (trad. din lb. rusă), Ed. Științifică și Enciclopedică, București, 1979.
56. KITTEL, CH., *Phys. Rev.*, 110, 1245, 1958.
57. KITTEL, CH., *Quantum Theory of Solids*, J. Willey, Inc., New York, 1963.
58. KITTEL, CH., *Introducere în fizica corpului solid* (trad. din lb. engleză), Ed. Tehnică, București, 1972.
59. KOMPANEYETS, A. S., *Theoretical Physics*, Mir, Moskva, 1965.
60. KOVACS, K., ȘTETIU, P., IUGA, M., ILIESCU, T., MICLEA I., *Lucrări practice de spectroscopie*, Univ. Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca, 1976.
61. LANDAU, L. D., LIFȘIT, E. M., *Ștatisticeskaia fizika i kinetika*, Nauka, Moskva, 1977.
62. LANDAU, L. D., LIFȘIT, E. M., *Mecanica cuantică* (trad. din lb. rusă), Ed. Tehnică, București, 1965
63. LANDSBERG, G. S., *Optica* (trad. din l. rusă), Ed. Tehnică, București, 1958.
64. LEVICI, V. G., VDOVIN, IN. A., MIAMLIN, V. L., *Kurs teoreticeskoi fiziki*, Nauka, Moskva, 1962.

65. LEBEDEEV, N. N., *Funcții speciale și aplicațiile lor* (trad. din lb. rusă), Ed. Tehnică București, 1957.
66. LICEA, I., *Fizica metalelor și aliajelor*, Univ. București, 1980.
67. LUIBARSKI, G., *Toriagrup i ih primenenie v fiziki*, Gost. Izd. Mat. Fiz. Lit., Moskva, 1958.
68. LUCA, E., *Elemente de fizică modernă*, vol 1 și 2, Ed. Junimea, Iași, 1976.
69. LUCA, E., CIUBOTARU, C., ZET, GH., VASILIU, A., *Fizica*, Ed. didactică și pedagogică, București, 1976.
70. LYNTON, E. A., *Superconductivity*, Meth and Co Ltd, London, 1969.
71. MALEAROV, V. V., *Bazele teoriei nucleului atomic* (trad. din lb. rusă), Ed. Tehnică, București, 1961.
72. MARTALOGU, G. I., CIOCĂNEL, A. I., *Tehnici și metode experimentale nucleare* Ed. Tehnică, București, 1965.
73. MARTON, L., *Solid State Physics*, Acad. Press, New York, 1959.
74. MATTIS, D. C. *Teoria magnetismului*, Mir, Moskva, 1969.
75. MATTUK, R., *Feynmanovskie diagrami v probleme mnogih tel*, Mir, Moskva, 1969.
76. MAXIM, I., *Materiale nucleare*, Ed. Acad. R.S.R., București, 1969.
77. MESIAH, A., *Mecanica cuantică*, vol. 1 și 2 (trad. din lb. franceză), Ed. Științifică București, 1973.
78. MERCEA, V. ș.a., *Introducere în spectrometria de masă*, Ed. Tehnică, București, 1978.
79. MIDREL, G., *Electrofizika*, Mir, Moskva, 1972.
80. MONGJIN, C., O'TOOLE, C., *Physics in Industry*, Pergamon Press, New York, 1976.
81. MOISIL, GH. *Fizica pentru ingineri* vol. I, II, Ed. Tehnică București 1967—1968.
82. MOȚOC, C., *Acțiunea radiațiilor asupra corpului solid*, Ed. Acad. R.S.R., București, 1964.
83. MUHIN, K. N., *Fizica nucleară experimentală*, vol. I și II, (trad. din lb. rusă), Ed. Tehnică, București, 1981—1982.
84. MUȘCUTARIU, I., *Cristale lichide*, Ed. Tehnică, București, 1982.
85. MUIRHEAD, H., *The Physics of Elementary Particles*, Pergamon Press, Oxford, 1965.
86. NICULA, AL., *Fizica semiconducătoarelor și aplicații*, Ed. didactică și pedagogică, București, 1975.
87. NOVACU, V. ș.a., *Teoria particulelor elementare*, Ed. Acad. R.S.R., București, 1970.
88. PERELMAN, I., RASMUSSEN, I., *Alfa radioactivnost*, Mir, Moskva, 1959.
89. PLĂVIȚU, C. N., *Fizica moleculară*, Ed. didactică și pedagogică, București, 1982.
90. POIENARU, D. N., IVAȘCU, M., SÂNDULESCU, A., *Studiul dezintegrării alfa prin metodele fisiunii*, Progrese în fizică, București, 1979.
91. POP, I., CRIȘAN, M., *Fizica corpului solid și a semiconducătorilor*, Ed. didactică și pedagogică, București, 1982.
92. POP, I., ș.a., *Structura corpului solid*, Ed. Acad. R.S.R. București, 1971.
93. POP, I., *Magnetismul pământurilor rare*, Ed. Acad. R.S.R., București, 1969.
94. POP, I. ș.a., *Rezonanța nucleară în metale*, Ed. Acad. R.S.R., București, 1973.
95. POPESCU, I. M. ș.a., *Aplicații ale laserilor*, Ed. Tehnică, București, 1979.
96. POPESCU, I. M., DRĂGĂNESCU, V., VASILIU, V., *Laserii și unele aplicații în știință și tehnică*, Ed. Științifică, București, 1969.
97. POPESCU, I. M. ș.a., *Probleme rezolvate de fizica laserilor*, Ed. Tehnică, București, 1975.
98. PORTIS A. M., *Appl. Phys. Letters*, 2, 69, 1963.
99. RÎPEANU, S., PĂDUREANU, I., CRISTIAN, I., CUCULEANU, V., ROTĂRESCU, G., AVRIGEANU, M., *Tehnici și măsurători la reactorii nucleari*, Ed. Acad. R.S.R. București, 1983.
100. RESNICK, R., *Relativity and Early Quantum Theory*, John Wiley and Sons, New York, 1972.
101. RONALD, O., ADLER, M., BAZIN, M., SCHRIFER, M., *Introduction to general relativity*, Mc Graw-Hill, New York, 1965.
102. ROSS, M., *Laser applications*, Mir, Moskva, 1965.
103. RUMER, I. U. B., RÎVKIN, M. S., *Termodinamika, statisticeskaia fizika i kinetika*, Nauka, Moskva, 1977.
104. SABATA, C., BONDREAS, M., ROTENSTEIN, B., MUNTEANU A., *Conversia energiei solare*, Ed. Facla, Timișoara, 1982.
105. SACHS, M., *Solid State Theory*, Mc. Graw-Hill, New York, 1972.
106. ȘANDRU, P., ȚOPA, A., *Radionuclizii*, Ed. Acad. R.S.R., București, 1968.

107. SANIELEVICI, S. A., BOGDAN, D., *Structura nucleului atomic și tranziții radioactive*, Ed. Acad. R.S.R., București, 1958.
108. SANIELEVICI, S. A., *Radioactivitatea*, Ed. Acad. R.S.R., București, 1965.
109. SEAVEY, M. H., TANNENWALD, J., *Phys. Letters*, 1, 168, 1958.
110. ȘIROKOV, IN. M., IUDIN, N. P., *Iadernaia fizika*, Nauka, Moskva, 1980.
111. SOOHOO R. F., *Magnetic Thin Films*, Harpey Row, New York, 1965.
112. SPARKS, M., *Ferromagnetic relaxation theory*, Mc. Graw-Hill, New York, 1964.
113. ȘPOLSKI, S. V., *Fizica atomică*, vol I și II, (trad. din lb. rusă), Ed. Tehnică, București, 1954—1964.
114. STAN, I., INȚA, I., *St. cerc. științifice*, Iași, IX, 1. 137, 1958.
115. STONEHAM, A. M., *Theory of defects in solids*, Clarendon Press, Oxford, 1975.
116. STREIFWIESER, A., *Molecular orbital theory*, Mir, Moskva, 1965.
117. TĂTARU, E., INȚA, I., Czech, J., *Phys.*, B19, 1603, 1969.
118. TEODORESCU, E. I., *Acceleratoare de particule încărcate*, Ed. Acad. R.S.R., București, 1967.
119. TEODORESCU, E. I., ș.a.. I., *Optică electronică și acceleratoare de particule*, Ed. didactică și pedagogică, București, 1967.
120. TORO I., *Fizica și filozofia*, Ed. Facla, Timișoara, 1972.
121. TORO, I., *Neutrînul și rolul lui în fizică*, Ed. Enciclopedică, București, 1969.
122. TUDOSE, C., CUCUREZEANU, I. și col., *Fizica*, Ed. didactică și pedagogică, București, 1981.
123. TYABLIKOV, S. V., *Metodî evantovoi teorii magnetizma*, Nauka, Moskva, 1965.
124. URSU, I., *Rezonanța electronică de spin*, Ed. Acad. R.S.R., București, 1965.
125. URSU, I., *La résonance paramagnétique électronique*, Dunod, Paris, 1968.
126. URSU, I., *Energia atomică*, Ed. Științifică, București, 1973.
127. URSU, I., GRECU, V., RUSU, M., *Fizica atomică și nucleară*, Univ. București, 1972.
128. URSU, I., *Fizica și tehnologia materialelor nucleare*, Ed. Acad. R.S.R., București, 1982.
129. VAINSTEIN, B. K., *Structure Analysis by Electron Diffraction*, Pergamon Press, London 1964.
130. VASIU, M., *Fizica teoretică*, Ed. didactică și pedagogică, București, 1965.
131. VĂSARU, GH., *Izolopii stabili*, Ed. Tehnică, București, 1968.
132. VESCAN, T., *Fizica teoretică*, vol. II., Univ. Iași, 1958.
133. VESELOV, M. S., *Teoria cuantică elementară a atomilor și moleculelor* (trad. din lb. rusă), Ed. Tehnică, București, 1957.
134. VÎLCOV, N., *Fiziunea nucleară izomeră*, Ed. Acad. R.S.R., București, 1971.
135. VONSOVSKI, S. V., *Magnetismul* (trad. din lb. rusă), Ed. Științifică și Enciclopedică, București, 1981.
136. VONSOVSKI, S. V., *Feromagnitnii rezonans*, Nauka, Moskva, 1961.
137. WERT C. A., THOMSON R. M., *Fizika tveordova tela*, Mir, Moskva, 1966.
138. WICHMAN, E., *Quantum Physics*, Berkeley, 1970.
139. ZIJLSTRA, H., *Experimental method in magnetism*, North-Holland, Amsterdam, 1962.

Control științific: DR. DAN VAMANU

Redactor: NATALIA FIUCIUC

Tehnoredactor: ELLY GORUN

Coperta: ARH. MARIANA ZIELINSKI

Bun de tipar. 19.06.1985

Coli de tipar. 27,

C. Z. 530 (082)



c. 41—I. P. Informația
Str. Brezoianu Nr. 23—25.
București